HAL
open science

Ingénierie d'indice optique à base de nanostructures métalliques

Patrick Bouchon

To cite this version:

Patrick Bouchon. Ingénierie d'indice optique à base de nanostructures métalliques. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Ecole Polytechnique X, 2011. Français. NNT : . pastel-00642068

HAL Id: pastel-00642068

https://pastel.hal.science/pastel-00642068v1

Submitted on 17 Nov 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LABORATOIRE
DE PHOTONIQUE
ET DE NANOSTRUCTURES

Laboratoire de Photonique et de Nanostructures
CNRS – UPR20

École Doctorale de l'École Polytechnique

Ingénierie d'indice optique à base de nanostructures métalliques

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 06 Septembre 2011

pour l'obtention du

Diplôme de Docteur de l'École Polytechnique
Spécialité Physique

par

Patrick Bouchon

Composition du jury

Rapporteurs :	M. Alexandre Bouhelier
	M. Stefan Enoch
Examinateurs :	M. Nicolas Bonod
	M. Riad Haïdar
	M. Fabrice Pardo
	M. Philippe Lalanne
Directeur de Thèse :	M. Jean-Luc Pelouard

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE LAB

Remerciements

La thèse marque un nouveau départ, où l'on efface ce qui a été fait avant et on peut repartir de zéro. Le doctorant doit alors faire ses preuves d'aptitude à la recherche en l'espace de trois années. Mais ma vie dans le monde de la recherche à commencer avant cette thèse, et c'est même ces différents stages qui ont faconné mon goût pour la recherche. Je tiens à remercier Gilles Vergnaud et toute son équipe (Christine, Philippe et Yolande) pour m'avoir accueilli et considéré comme un égal à bien des égards il y a maintenant sept ans. Lleno de agradecimiento a Santos F Alvarado. Mon passage à Zürich aura été trop court, mais il m'aura donné un apercu du meilleur de la recherche. C'est ce stage ainsi que les cours de Henri-Jean Drouhin et Emmanuel Rosencher qui m'ont poussé à faire une thèse en physique et non dans un autre domaine, et à rechercher un mélange de théorie et d'expérience. Je suis tombé sur le sujet de mes rêves un peu par hasard, et je remercie Riad et Jean-Luc de l'avoir élaboré. Merci à Riad pour son enthousiasme, son dynamisme et sa curiosité scientifique. Je tiens à remercier Fabrice, chercheur génial qui a réponse à tout (après, si on n'est pas sûr à 100%, on peut toujours parier avec lui sur la validité de sa réponse) venu compléter cette dream team d'encadrement après mon stage.

La fin de thèse a été soumise à un calendrier serré, en partie de la faute de Raphaël (d'aucuns le désignent sous le nom d'Eusébe pour des raisons qui m'échappent.) Je remercie l'Ecole doctorale et en particulier Christine Ferret d'avoir fait preuve de souplesse sur mon cas. Je remercie également les membres du jury qui ont réussi à concilier leur agenda avec ce calendrier, mais aussi pour les discussions scientifiques qui ont découlé de la lecture de ce manuscrit.

Côté ONERA, j'ai commencé ma thèse dans l'open space des doctorants (Salut Fred et Claire !) au D1, c'était une période qui a vu le développement des book makers sur l'heure d'arrivée de Fred, je leur souhaite à tous les deux bon courage pour la fin de thèse et la suite... J'ai ensuite choisi de m'exiler au Jetstream pour pouvoir méditer sur la suite de ma thèse. Il faut croire que j'ai un leadership naturel, puisque quelques volontaires ont fait des pieds et des mains pour me rejoindre en ce nouveau haut lieu des nanos et de SFII à l'ONERA.

Je remercie à nouveau Riad, mais également Julien, Grégory et Charlie qui ont aussi pris un aller sans retour. Malgré le chemin à parcourir, Jérôme, Joël, Alain et Sylvain viennent encore nous rendre visite régulièrement, qu'ils en soient remerciés et il arrive épisodiquement qu'un CIO ou ERIO s'égare par chez nous. Je suis heureux d'avoir rejoint le groupe nanos de l'onera, et en particulier de pouvoir poursuivre mon travail avec mes nouveaux collègues. Julien, c'est appréciable d'avoir quelqu'un qui sait quelle est la meilleure couleur. Grégory, notre collaboration aura commencé par révolutionner le monde des interfaces dans les outils de modélisations électromagnétiques, Je suis sûr que c'est un premier pas avant de conquérir le monde.

Du côté LPN, j'ai fait preuve d'une stabilité à toute épreuve, restant dans le même bureau pendant plus de 3 années et demie, alors que j'y ai vu défiler une douzaine de doctorants/ post-docs/ stagiaires (dans le désordre, Julien, Gulnar, Thibaut, Charlie, Grégoire, Sylvain, Citlali, Ngoc, Simon et Nicolas.) Certains doivent croire que je suis insupportable, même si dans ce cas, Nicolas fait preuve d'une résistance à toute épreuve. Mais la vérité c'est que c'est tout simplement le meilleur bureau de tout Marcoussis dont l'exquis voisinage n'égale que le splendide panorama et chacun se bat pour y passer un moment. Merci à Nathalie et Christophe, nos anges-gardiens en salle blanche, mais également animateurs socio-culturel de Phydis. Merci aussi à Laurence qui m'aura aussi apporté une grande aide lors du développement de mes procédés, ainsi qu'à Edmond, Stéphane, Xavier, Christian, David, Christophe R. et le reste de l'équipe techno.

Je remercie tout particulièrement Charlie, la destinée (et nos encadrants) voulait qu'on marie nos thématiques de recherche. Si les plasmonanoteubs n'auront pas vu le jour, nous aurons eu une fructueuse réussite sur une autre thématique, et j'espère que ce n'est que le début ! Merci aussi pour toutes nos discussions non-scientifiques ! Merci aussi à Thomas qui a partagé notre bureau. Désolé pour toi, mais les Heat ne gagneront pas non plus cette année (ils ne joueront même pas), et le Barca non plus. Heureusement, il reste Fifa où tu as une chance de battre le Mulhouse FC... sur un coup de dés bien sûr ! Il paraît que je suis le roi de la bisque, mais Emilie a un super niveau, c'est même elle qui m'a appris ce que c'était, rien que pour ça je me dois de la remercier. Mais en plus, elle a été le seul PF du J3 pendant plus d'une année, ça n'a pas du être facile tous les jours !

J'ai également eu la chance de vivre deux belles histoires courtes avec Benjamin puis Quentin, j'ai beaucoup appris lors de leur encadrement, j'ose croire que ça a été réciproque, et j'ai la chance que notre histoire se poursuive avec Quentin. Je sais que sous leur carapace de rugbyman se cache un coeur tendre et qu'ils auront les larmes aux yeux à la lecture de ces lignes.

Je remercie tous les autres doctorants, stagiaires et post-doctorants que j'ai cotoyé et avec lesquels on a déjà passé quelques bon moments, en particulier Inès, Clément, Simon, Gulnar, Ha, William, Martin, Florence, Hermance, Stéphanie, Florian, et bon courage aux nouveaux (Florian et Christelle). Une pensée pour les anciens qui ont été poursuivre leur aventure ailleurs aussi (Thibaut, Emmanuel, Bruno.)

Je tiens enfin à remercier mes amis, mes parents, mes chers soeurs et frère. Et bien évidemment à remercier Anne pour tout l'amour que tu m'as apporté. Cette année aura été riche en évènements pour nous deux, et tu as toujours su faire preuve d'un grand courage.

A mon tour de te soutenir pour que tu passes docteur deuxième dan. Mais tu auras aussi droit au soutien supplémentaire de Raphaël qui a pris de plus en plus de place tout au long de l'année passée. Il a déjà su faire montre d'un savoir-vivre inné en ne venant au monde qu'une fois ma thèse soutenue et nous soumet à un entraînement intensif pour diminuer nos heures d'improductivité (essentiellement la nuit en somme.)

Table des matières

Remerciements **3**

Introduction **1**

I Introduction à la plasmonique **5**

1 Plasmons de surface **7**

1.1 Les Plasmons 7

1.1.1 Historique 7

1.1.2 Théorie de Drude : les plasmons de volume et les plasmons de surface 8

1.1.3 Condition d'existence des plasmons de surface 8

1.1.4 Relation de dispersion des plasmons de surface 10

1.2 Propriétés des plasmons de surface dans l'infrarouge 11

1.2.1 L'infrarouge 11

1.2.2 Longueur de propagation et confinement du champ 13

1.3 Excitation des plasmons et couplage à un réseau 16

1.3.1 Nécessité d'un couplage entre les plasmons de surface et les photons . 16

1.3.2 Dispositifs coupleurs 16

1.4 Conclusion 18

2 Résonances plasmoniques dans les réseaux sub-longueurs d'onde **19**

2.1 Les anomalies de Wood 19

2.1.1 Anomalies de Wood-Rayleigh 19

2.1.2 Anomalies de résonance 20

2.2 Les résonances de Fabry-Perot 21

2.2.1 Indice effectif 21

2.2.2 Résonance type Fabry-Perot 22
2.3 Conclusion 26

II Etude de résonateurs plasmoniques 29

3 Etude théorique et expérimentale de nanorésonateurs plasmoniques 31
3.1 Dimensionnement d'un nanorésonateur plasmonique à grand rapport d'aspect dans l'infrarouge 32
3.2 Fabrication 34
3.2.1 Utilisation d'un moule cristallin 34
3.2.2 Procédé de fabrication 37
3.3 Caractérisation optique de la structure 41
3.3.1 Description du montage 41
3.3.2 Caractérisation optique et simulations 41
3.4 Conclusion 42

4 Mécanisme de focalisation de l'énergie dans des ouvertures sub-longueur d'onde 47
4.1 Analyse énergétique 48
4.1.1 Flux de Poynting 48
4.1.2 Décomposition du flux 50
4.2 Analyse d'une interface isolée 53
4.2.1 Formalisme de l'interface isolée 53
4.2.2 Étude d'un système résonant 54
4.2.3 Étude d'un système hors résonance 54
4.3 Conclusion 55

5 Métamatériau à grand indice de réfraction 57
5.1 Equivalence entre un réseau métallique et un métamatériau 57
5.1.1 Formalisme de Shen, Catrysse et Fan 57
5.1.2 Application au réseau de sillons en or 59
5.2 Etude en incidence angulaire 60
5.2.1 Cas de l'incidence dans le plan perpendiculaire aux sillons 61
5.2.2 Mesure expérimentale en incidence dans le plan des sillons 62
5.3 Nouveau formalisme d'équivalence 64
5.4 Conclusion 65

6 Couplage de résonateurs plasmoniques 67
6.1 Couplage fort entre les plasmons de surface et le mode de cavité 68
6.1.1 Couplage fort dans des réseaux de sillons 68
6.1.2 Analyse énergétique de la résonance plasmonique à grand facteur de qualité 72
6.2 Couplage entre des résonateurs plasmoniques MIM verticaux 76
6.2.1 Couplage entre deux résonateurs de même indice effectif 76

6.2.2 Absorbant large bande 80
6.3 Couplage entre des résonateurs MIM plasmoniques horizontaux : application au tri de photons 82
6.3.1 Les structures métal/isolant/métal horizontales 82
6.3.2 Couplage entre les résonateurs MIM 83
6.3.3 Influence de la géométrie du biMIM sur le couplage 85
6.3.4 Fabrication et caractérisation de multi-résonateurs MIM horizontaux . 87
6.3.5 Application au tri de photons indépendant de l'angle d'incidence . . . 90
6.4 Conclusion 92

III Développement de méthodes numériques 95

7 Méthode modale B-spline 97
7.1 Méthode modale B-spline 98
7.1.1 Equation aux valeurs propres 98
7.1.2 Algorithme de matrices S 103
7.1.3 Convergence de BMM 104
7.2 Incidence conique 107
7.2.1 Equations de Maxwell en incidence conique 107
7.2.2 Formalisme de matrices S en incidence conique 109
7.2.3 Exemples numériques 109
7.3 Conclusion et perspectives 111

8 Accélération des calculs avec les matrices creuses 113
8.1 Calculs accélérés de valeurs propres 114
8.1.1 Problème général et techniques de résolution 114
8.1.2 Approximation du problème général 116
8.1.3 Exemples numériques 117
8.2 Algorithme de matrices S réduit 119
8.2.1 Principe de l'algorithme réduit 119
8.2.2 Applications 120
8.3 Conclusion 122

9 Modèle analytique multifentes et multisillons 123
9.1 Modèle analytique multi-fentes et multi-sillons 124
9.1.1 Présentation du problème 124
9.1.2 Modèle mono-mode 125
9.1.3 Modèle d'impédance de surface 127
9.1.4 Résolution pour les réseaux multi-sillons 128
9.1.5 Résolution pour une combinaison de fentes et de sillons 131
9.2 Exemple numérique : Réseaux de multi-sillons 132
9.3 Conclusion 133

10 Conception de fonctions optiques avec un algorithme génétique 135
10.1 Algorithme génétique 136
10.1.1 Principe de la conception de fonctions optiques 136
10.1.2 Choix de l'algorithme génétique 137
10.1.3 Déroulement de l'algorithme génétique 139
10.1.4 Paramètres et codage de l'algorithme génétique 140
10.2 Exemples d'optimisation de fonctions optiques avec l'algorithme génétique . . 141
10.2.1 Optimisation d'un absorbant large-bande couvrant une octave 141
10.2.2 Prise en compte de contraintes technologiques 143
10.2.3 Exploration de nouveau concepts 143
10.3 Conclusion et perspectives 145

Conclusion et perspectives 147

Bibliographie 156

Introduction

Ma thèse s'est déroulée entre l'unité physique des dispositifs du laboratoire de photonique et de nanostructures (LPN/CNRS) et l'unité concepts innovants en optique à l'ONERA/DOTA. Les deux équipes collaborent étroitement depuis plusieurs années pour concevoir, fabriquer et caractériser des nanostructures métalliques appliquées à l'optique infrarouge. La structuration de la matière se fait à une échelle sub-longueur d'onde, qui permet par exemple de créer un matériau artificiel caractérisé par son indice effectif. Il est alors possible de réaliser des fonctions optiques plus ou moins complexes (filtres, absorbants, lentilles). Ces dispositifs permettent une miniaturisation des systèmes optiques et une amélioration des caractéristiques des détecteurs. Par ailleurs, cela ouvre la voie à l'intégration de la fonction optique au voisinage d'une puce de détection.

Objectifs et enjeux de mon travail de thèse

Cette thèse vise en premier lieu à développer des codes de conception de composants plasmoniques basés sur des modèles électromagnétiques originaux permettant d'accélérer les calculs pour des structures à motifs complexes. Des algorithmes métaheuristiques sont ensuite utilisés, mettant à profit ces codes électromagnétiques, pour dimensionner des fonctions optiques. L'autre objectif de cette thèse est l'étude de nano-résonateurs plasmoniques tant d'un point de vue théorique et conceptuel, grâce aux outils précédemment développés, que technologique (salle blanche) et expérimental (caractérisation optique).

La structuration de la matière à des échelles très sub-longueur d'onde ($< \lambda/10$) a ouvert la voie à la conception et à la fabrication de fonctions optiques sur des dispositifs très compacts, mais qui se complexifient, posant alors le problème du temps nécessaire à dimensionner un objet. Pour modéliser des empilements de couches structurées suivant une

ou deux dimensions, les méthodes les plus performantes sont les méthodes modales, parmi lesquelles la méthode modale de Fourier est considérée comme une référence. J'ai développé lors de ma thèse une méthode modale basée sur les B-splines (BMM) qui dispose de plusieurs atouts pour accélérer les calculs. En premier lieu, elle utilise un maillage non-uniforme qui permet de densifier le nombre de points lors des sauts de permittivité. L'autre avantage de cette méthode est de produire une équation aux valeurs propres qui génère des matrices creuses. Celles-ci peuvent être exploitées, grâce à des algorithmes comme ARPACK, pour résoudre partiellement le problème aux valeurs propres en un temps bien plus court que celui nécessaire à traiter le problème complet (*i.e.* trouver toutes les valeurs propres).

Le confinement de l'absorption dans un volume sub-longueur d'onde est un problème d'importance majeure pour des domaines variés comme la détection infrarouge ou les cellules solaires. Une voie prometteuse pour confiner l'absorption est d'utiliser des effets plasmoniques. En effet, le couplage d'une onde incidente avec une surface métallique structurée à une échelle sub-longueur d'onde permet un contrôle accru de la lumière (transmission extraordinaire, hyperfocalisation du champ, absorption totale...). J'étudie dans cette thèse théoriquement et expérimentalement l'absorption totale d'un miroir métallique sur lequel sont gravés des sillons à grand rapport d'aspect et occupant une faible fraction de la surface. Fabriquer des sillons de grand rapport d'aspect dans du métal est un défi technologique, et je développe ici une technique originale de fabrication basée sur un moule en semiconducteur et une croissance électrolytique. Cette structure peut être vue comme un matériau avec un indice artificiel très élevé, autrement dit un métamatériau. L'approche métamatériau de réseaux métalliques a été abordée théoriquement dans la littérature[1], et je valide cette démarche expérimentalement et complète ce formalisme. Enfin, nous le verrons, à la résonance, l'absorption se fait en théorie dans les parois métalliques du sillon et le mécanisme par lequel l'énergie de l'onde incidente à une longueur d'onde λ est concentrée dans une ouverture de dimension $\lambda/70$ reste à élucider. La compréhension de cette structure de géométrie relativement simple (un sillon périodique) nous a permis d'étudier des phénomènes plus complexes comme le couplage fort entre plasmons de surface et modes de cavité dans le sillon ou bien encore des motifs plus complexes, constitués par exemple de plusieurs sillons adaptés pour résonner à différentes longueurs d'onde. Leur combinaison élargit la bande d'absorption totale et peut couvrir toute une bande de l'infrarouge. Elle permet également de faire du tri de photons dans une période sub-longueur d'onde, indépendamment de l'angle d'incidence.

Organisation du mémoire

Mon manuscrit se partage en trois parties. Dans une première partie, je fais une introduction à la plasmonique et en particulier aux résonateurs plasmoniques. Dans la deuxième partie, je décris les résultats obtenus lors de ma thèse sur les résonateurs plasmoniques et sur l'étude du couplage de plusieurs résonances. Enfin, dans une dernière partie, j'aborde les modèles électromagnétiques développés et leur intérêt pour la conception de fonctions optiques.

[1] Shen et al., « Mechanism for designing metallic metamaterials with a high index of refraction ».

Première partie

Dans le chapitre 1, j'introduis les plasmons de surface dans l'infrarouge et je détaille leurs propriétés dans l'infrarouge et les moyens pour les exciter optiquement. Une technique d'excitation des plasmons de surface est l'utilisation de réseaux métalliques. Ils peuvent être alors le siège de plusieurs types de résonances plasmoniques qui sont présentées dans le chapitre 2. En particulier dans un réseau de sillons, il peut y avoir une résonance de type Fabry-Perot qui est étudié en détails dans ce chapitre. Si le réseau est dimensionné adéquatement, cette résonance conduit à une absorption *totale indépendante de l'angle d'incidence*, ce qui peut apparaître comme un paradoxe car plus de 95% de la surface du réseau est un miroir quasi-parfait. Cette structure a un intérêt évident pour les applications de détection infrarouge, car elle permet de concevoir des nano-antennes isotropes d'efficacité unitaire. Elle constitue le point de départ de l'étude présentée dans la deuxième partie.

Deuxième partie

Le chapitre 3 comprend la substantifique moelle de mes efforts sur le dimensionnement, la fabrication et la caractérisation de réseaux de sillons à grand rapport d'aspect ($\gtrsim 10$) absorbant dans l'infrarouge. J'ai développé une technique utilisant un moule en arséniure de gallium dopé sur lequel est fait un dépôt électrolytique d'or qui permet d'obtenir des sillons fins (150nm) et profonds (2μm) dans une couche métallique. Cette structure est dimensionnée pour être un absorbant total bi bandes ($3-5\mu$m et $8-12\mu$m), ce qui est confirmé expérimentalement.

Dans les deux chapitres suivants, je décris des aspects plus fondamentaux de cette structure. Le chapitre 4 explique le mécanisme responsable du phénomène de *funneling* (redirection et concentration de l'énergie vers des ouvertures très sub-longueurs d'onde ($< \lambda/70$)) grâce à une analyse énergétique. On montre que le funneling est dû à l'interférence entre l'onde incidente et le champ évanescent. Par ailleurs, j'exploite le formalisme d'équivalence développé par Shen *et al.* en 2005 entre un réseau métallique et une couche diélectrique[2] pour modéliser le comportement du réseau de sillons que j'ai fabriqué. Je montre ainsi au chapitre 5 qu'il peut être vu comme une couche diélectrique d'indice effectif très élevé ($n \simeq 20$). Je complète cette étude théorique par une caractérisation angulaire dans le plan des sillons.

Dans le chapitre 6, je présente différents phénomènes de couplage dans des réseaux métalliques. En premier lieu, je montre que dans le cas d'un réseau de sillons, il peut y avoir apparition d'un couplage fort entre les plasmons de surface et le mode localisé qui mène alors à deux états hybridés. Le premier état hybridé est caractérisé par une réflectivité spéculaire nulle, l'énergie incidente est réfléchie vers le premier ordre de diffraction du réseau tandis que le second état mène à une absorption totale à très grand facteur de qualité ($Q > 100$). Je décris également dans le chapitre 6 les phénomènes de couplage dans des structures multi-résonateurs. Il est en effet possible de placer plusieurs sillons de dimensions très sub-longueur

[2] Ibid.

d'onde dans une période. De même, on peut placer plusieurs rubans métal/isolant/métal au sein d'une même période. Dans les deux cas, les résonateurs peuvent être dimensionnés pour résonner à différentes longueurs d'onde. Ils permettent de réaliser au choix des dispositifs présentant une absorption totale sur une large bande spectrale ou permettant un tri efficace des photons en fonction de leur longueur d'onde. Un échantillon comprenant deux résonateurs dans une période est fabriqué et caractérisé. Ces résultats confirment qu'il est possible à la fois d'élargir la bande d'absorption totale et de trier les photons entre les différents résonateurs.

Troisième partie

Les dernières structures plasmoniques étudiées pendant ma thèse se complexifient, et rendent d'autant plus laborieuses leur modélisation numérique et leur dimensionnement. Cette dernière partie est axée sur les modèles développés pendant ma thèse pour dépasser cette limitation. Dans le chapitre 7, je présente la méthode modale B-spline pour des structures 1D. Cette méthode utilise une base de B-splines sur un maillage non uniforme pour résoudre les équations de Maxwell. Son intérêt principal réside dans l'utilisation de matrices creuses avant résolution d'une équation aux valeurs propres. Je montre dans le chapitre 8 comment ces matrices creuses peuvent être utilisées pour accélérer les calculs en utilisant un algorithme de ARPACK, basé sur la méthode d'Arnoldi implicitement redémarré. L'utilisation d'un tel algorithme de résolution de l'équation aux valeurs propres ne permet cependant de résoudre le problème que pour un faible nombre de valeurs propres. L'algorithme de matrices S pour traiter les empilements de couches est adapté à cette situation.

L'analyse de structures multi-sillons/fentes peut être simplifiée à l'aide d'un modèle analytique traitant un mode unique par structuration, que je décris au chapitre 9. Ce modèle donne des résultats proches de ceux obtenus avec BMM et est utilisé dans le chapitre 10 avec un algorithme métaheuristique, pour faire du dimensionnement de structures. A titre d'illustrations, un absorbant total large-bande sur une octave et un filtre passe-bande ont été dimensionnés. Cet algorithme a un potentiel très important pour faire de la conception optique s'il est couplé avec une méthode numérique complète et rapide comme BMM.

Première partie

Introduction à la plasmonique

Chapitre 1 Plasmons de surface

Sommaire

1.1 Les Plasmons 7

1.1.1 Historique 7

1.1.2 Théorie de Drude : les plasmons de volume et les plasmons de surface 8

1.1.3 Condition d'existence des plasmons de surface 8

1.1.4 Relation de dispersion des plasmons de surface 10

1.2 Propriétés des plasmons de surface dans l'infrarouge 11

1.2.1 L'infrarouge 11

1.2.2 Longueur de propagation et confinement du champ 13

1.3 Excitation des plasmons et couplage à un réseau 16

1.3.1 Nécessité d'un couplage entre les plasmons de surface et les photons 16

1.3.2 Dispositifs coupleurs 16

1.4 Conclusion 18

Les plasmons de surface sont des modes électromagnétiques en polarisation transverse magnétique (TM) qui se propagent le long d'une interface métal/diélectrique. Ils correspondent au couplage entre une onde lumineuse se propageant dans le milieu diélectrique et l'oscillation des électrons dans le métal. Dans ce chapitre, je vais revenir sur la découverte des plasmons de surface et sur leur définition à partir des équations de Maxwell. Je détaillerai alors leurs propriétés dans la gamme spectrale de l'infrarouge (longueur de propagation et confinement à l'interface) avant de montrer qu'il est nécessaire d'avoir un dispositif de couplage pour pouvoir exciter les plasmons de surface.

1.1 Les Plasmons

1.1.1 Historique

La plasmonique a suscité un intérêt croissant lors de ces quinze dernières années, les plasmons permettent d'obtenir des propriétés optiques uniques grâce à un contrôle de la lumière à des échelles très sub-longueurs d'onde. Si ce regain d'intérêt, confirmé par la croissance exponentielle depuis les années 90 d'articles sur le sujet, est assez récent, les plasmons sont connus depuis bien plus longtemps. Leur "découverte expérimentale" remonte au début du XXème siècle par Wood qui observa des anomalies de réflexion sur un réseau métallique,

une de ces anomalies identifiée bien plus tard comme étant due aux plasmons de surface[1]. Il faudra attendre les années 50 pour que soient compris les phénomènes responsables de ces anomalies. En 1956, David Pines attribue les pertes subies lors de la diffraction d'électrons rapides sur une couche métallique aux oscillations collectives des électrons libres. Il dénomme "plasmon" le quantum d'excitation élémentaire des oscillations collectives d'électrons par analogie avec les oscillations électroniques de plasma dans les décharges de gaz[2]. La même année, Ugo Fano introduit le terme de "polariton" pour désigner l'oscillation couplée entre les électrons liés et la lumière à travers un milieu transparent[3]. En 1957, Rufus Ritchie montre que des plasmons peuvent exister proche de la surface du métal, c'est la première description théorique des plasmons de surface[4].

1.1.2 Théorie de Drude : les plasmons de volume et les plasmons de surface

Pour décrire les propriétés électroniques d'un métal idéalisé, on va utiliser le modèle de Drude qui assimile le métal à un gaz d'électrons[5]. Ce gaz d'électrons oscille à une fréquence plasma

$$\omega_p = \sqrt{\frac{N_e e^2}{\epsilon_0 m_e}} \tag{1.1}$$

où N_e est la densité d'électrons, e la charge de l'électron, ϵ_0 la permittivité du vide et m_e la masse de l'électron. Ce déplacement de la densité de charge dans le métal massif est un plasmon de volume dont le quantum d'énergie est $\hbar\omega_p$[6].

En 1957, Ritchie observe les pertes d'énergie d'un faisceau d'électrons traversant un film mince métallique, et relie ses observations aux travaux de Bohm et Pines sur les plasmons de volume, en prédisant l'existence de plasmons de surface[7].

Un plasmon-polariton de surface (SPP) est un mode couplé entre le plasmon de surface et une onde électromagnétique. Le champ électromagnétique lié à ce mode décroît exponentiellement dans les deux milieux et se propage le long de l'interface.

1.1.3 Condition d'existence des plasmons de surface

On considère l'interface entre deux régions homogènes, isotropes et non magnétiques (voir Fig 1.1) : d'un côté la région métallique, dont la permittivité suit le modèle de Drude sans

[1] Wood, « XLII. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum ».
[2] Pines, « Collective energy losses in solids ».
[3] Fano, « Atomic theory of electromagnetic interactions in dense materials ».
[4] Ritchie, « Plasma losses by fast electrons in thin films ».
[5] Kittel et al., *Introduction to solid state physics.*
[6] Bohm et al., « A collective description of electron interactions. I. Magnetic interactions » ; Pines et al., « A collective description of electron interactions: II. Collective vs individual particle aspects of the interactions ».
[7] Ritchie, « Plasma losses by fast electrons in thin films ».

perte et de l'autre un milieu diélectrique de permittivité ϵ_d. Le modèle de Drude donne l'expression de la permittivité du métal suivante : $\epsilon_m = 1 - \omega_p^2/\omega^2$.

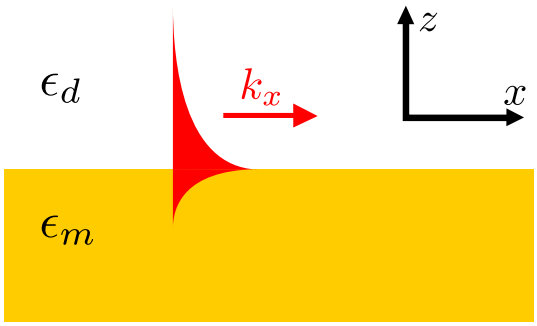

FIGURE 1.1 – Plasmon se propageant à l'interface plane entre un milieu diélectrique (ϵ_d) et un milieu métallique dont la permittivité ϵ_m suit le modèle de Drude. Le plasmon est évanescent dans les deux milieux.

On considère une onde électromagnétique polarisée transverse magnétique, le champ H est suivant l'axe y dans les deux milieux, et a une dépendance temporelle en $e^{-i\omega t}$. Les équations de Maxwell donnent l'équation classique de propagation des ondes :

$$\Delta H_y + \epsilon k_0^2 H_y = 0, \tag{1.2}$$

où $k_0 = \omega/c$ est le vecteur d'onde dans le vide. Pour résoudre cette équation pour les SPPs, il faut chercher des solutions évanescentes dans les deux milieux, qui seront donc de la forme :

$$H_y = \begin{cases} A_d e^{-\alpha_d z} e^{i(k_x x - \omega t)} & \text{si } z > 0 \\ A_m e^{\alpha_m z} e^{i(k_x x - \omega t)} & \text{si } z < 0 \end{cases} \tag{1.3}$$

où les termes $\exp(-\alpha_d z)$ et $\exp(\alpha_m z)$ décrivent l'atténuation exponentielle du plasmon de surface de part et d'autre de l'interface, on a donc $\alpha_d > 0$ et $\alpha_m > 0$. Le terme $\exp(ik_x x)$ décrit la propagation du plasmon le long de l'interface.

Lorsqu'on écrit les conditions de continuité du champ tangentiel magnétique à l'interface métal/diélectrique, on a :

$$H|_{z=0^+} = H|_{z=0^-}. \tag{1.4}$$

On écrit également la condition de continuité du champ électrique E_x, en utilisant l'équation de Maxwell-Ampère pour réintroduire le champ H_y :

$$\frac{1}{\epsilon_d} \frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=0^+} = \frac{1}{\epsilon_m} \frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=0^-}. \tag{1.5}$$

En remplaçant par 1.3, on a :

$$\frac{\alpha_d}{\alpha_m} = -\frac{\epsilon_d}{\epsilon_m} \tag{1.6}$$

Les α sont positifs ce qui implique que $\epsilon_d \epsilon_m < 0$, ce qui est bien le cas à l'interface entre un diélectrique ($\epsilon_d > 0$) et un métal ($\epsilon_m < 0$ lorsque $\lambda > \lambda_p$, où $\lambda_p \simeq 160$nm dans les longueurs d'ondes optiques pour l'or, et a des valeurs similaires pour les autres métaux).

Si on tient un raisonnement similaire pour des ondes transverses électriques, il faut prendre en compte les conditions de continuité à l'interface sur le champ électrique et sa dérivée :

$$E|_{z=0^+} = E|_{z=0^-} \tag{1.7}$$

$$\left.\frac{\partial E}{\partial z}\right|_{z=0^+} = \left.\frac{\partial E}{\partial z}\right|_{z=0^-} \tag{1.8}$$

L'équation d'onde 1.2 reste la même en TE pour le champ électrique, et les solutions correspondant aux ondes plasmoniques TE prennent la même forme que dans l'équation 1.3. On obtient au final la condition $\alpha_m = -\alpha_d$, ce qui est en contradiction avec la condition de positivité sur les α. En conclusion, les ondes plasmoniques de surface n'existent qu'en polarisation transverse magnétique et pas en polarisation transverse électrique.

1.1.4 Relation de dispersion des plasmons de surface

En remplaçant le champ magnétique dans l'équation 1.2 par les expressions obtenues dans les équations 1.3 et 1.6, on obtient la relation de dispersion des plasmons :

$$k_x = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}. \tag{1.9}$$

La courbe de dispersion des plasmons de surface, se propageant à l'interface entre un métal de pulsation plasma ω_p et l'air, est montrée en figure 1.2. Il faut distinguer deux catégories de plasmons de surface :

1) Les plasmons de surface localisés dans des nano-structures, comme des nanoparticules ou des structurations sur une surface métallique.

2) Les plasmons de surface délocalisés qui se propagent le long d'interfaces métal/diélectrique planes.

Par ailleurs, la courbe de dispersion des plasmons reste toujours en dessous de la ligne de lumière $\omega = ck_x$, il n'est donc pas possible d'exciter les plasmons de surface sur une surface plane infinie avec une onde plane. Autrement dit, on ne peut avoir égalité simultanée en ω et k entre les ondes plasmoniques et optiques. Nous verrons dans la section suivante dans quelle situation on peut obtenir l'accord de phase pour exciter les plasmons de surface.

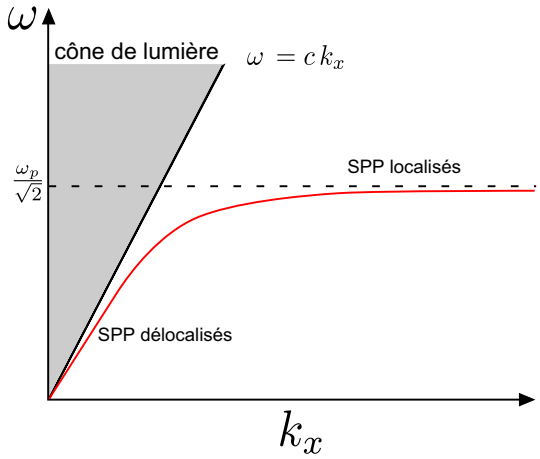

FIGURE 1.2 – La relation de dispersion des plasmons de surface se propageant à l'interface entre un métal de pulsation plasma ω_p et de l'air. La courbe reste toujours en dessous de la ligne de lumière $\omega = ck_x$, il n'est donc pas possible d'exciter les plasmons de surface sur une surface plane infinie avec une onde plane.

1.2 Propriétés des plasmons de surface dans l'infrarouge

1.2.1 L'infrarouge

C'est à la fin du siècle des lumières, en 1800 que l'astronome anglais William Herschel confirme l'existence du spectre infrarouge. Avec un simple thermomètre, il mesura la température des différentes longueurs d'onde du spectre solaire visible à la sortie d'un prisme. De manière surprenante, il obtint la température la plus élevée en se plaçant au delà du rouge et en déduisit qu'il existait une lumière "invisible" en dehors du spectre visible, correspondant à l'infrarouge[8]. Je vais présenter succinctement dans cette partie l'intérêt de cette gamme spectrale pour la détection à partir de la loi de Planck et des bandes de transmission de l'atmosphère.

Loi de Planck

La loi de Planck, basée sur la quantification de l'énergie électromagnétique, donne la luminance spectrique du rayonnement électromagnétique émis par un corps noir :

$$\left[\frac{\partial L(\lambda, T)}{\partial \lambda}\right] = \frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \tag{1.10}$$

qui s'exprime en W.m^2.sr, et où h est la constante de Planck, T la température, λ la

[8] HERSCHEL, « Experiments on the Refrangibility of the Invisible Rays of the Sun. By William Herschel, LL. DFRS » ; HERSCHEL, « Investigation of the Powers of the Prismatic Colours to Heat and Illuminate Objects; With Remarks, That Prove the Different Refrangibility of Radiant Heat. To Which is Added, an Inquiry into the Method of Viewing the Sun Advantageously, with Telescopes of Large Apertures and High Magnifying Powers. By William Herschel, LL. DFRS ».

longueur d'onde, k_B la constante de Boltzmann et c la vitesse de la lumière.

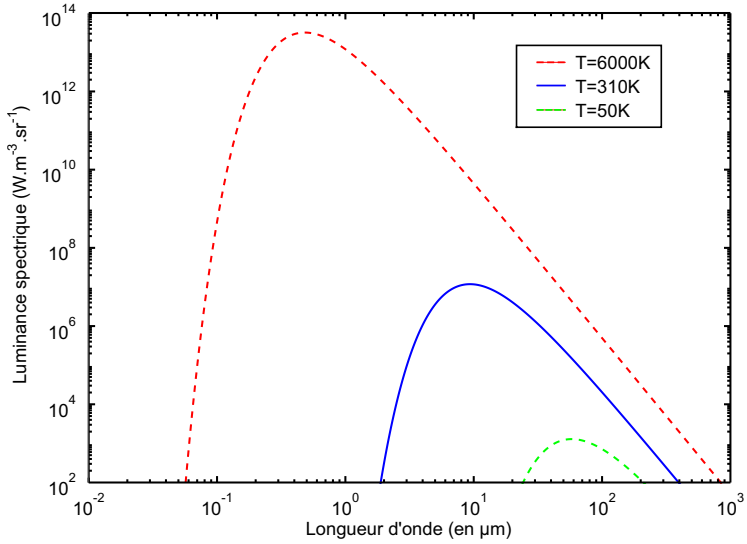

FIGURE 1.3 – Loi de Planck donnant la luminance spectrique du corps noir à différentes températures. La température de 6000K correspond à la température de la photosphère du Soleil et celle de 300K au rayonnement émis par notre environnement.

La figure 1.3 montre la loi de Planck du rayonnement du corps noir pour quelques cas typiques. En premier lieu la température de 6000K équivalente au spectre émis par le Soleil. La portion du spectre visible par l'œil humain correspond au maximum de luminance. Par ailleurs le rayonnement de notre environnement correspond à l'émission d'un corps noir vers 300K, le maximum est atteint à 10μm. Si la température de la source augmente, le maximum d'émission du corps noir est décalé vers les basses longueurs d'onde, ce qui est donné par la loi de Wien, approximation de l'équation 1.10 lorsque $\lambda \ll \frac{hc}{k_B T}$:

$$\lambda_{max} = \frac{2898}{T} \mu\text{m}. \tag{1.11}$$

L'infrarouge a donc un intérêt évident du fait que chaque corps émet son propre rayonnement et n'a pas besoin d'une source extérieure pour être détecté comme c'est le cas en imagerie visible.

Transmission spectrale de l'atmosphère

Pour les détections à grande distance, il faut également prendre en compte la transmission atmosphérique. Les vibrations et rotations des liaisons chimiques des molécules de l'air (CO_2, H_2O,...) sont responsables de l'absorption du rayonnement à certaines longueurs d'onde dans l'infrarouge. Il existe cependant de larges plages de transparence de l'atmosphère, comme on peut le voir sur la figure 1.4 : les plus utilisées pour l'imagerie infrarouge sont les bandes II

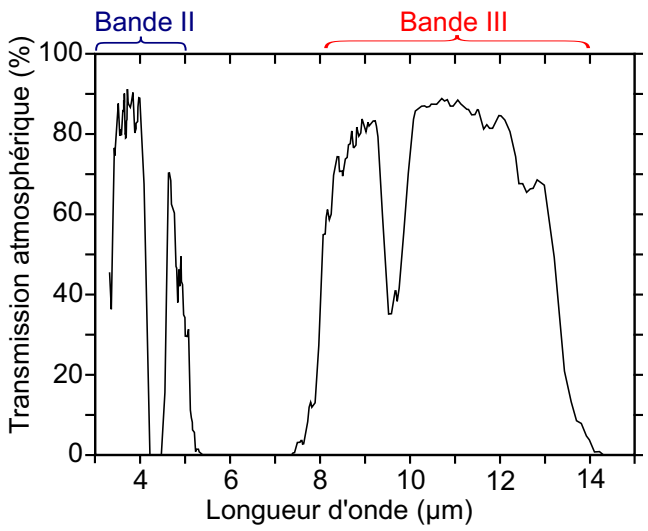

FIGURE 1.4 – Transmission de l'atmosphère dans le spectre infrarouge pour un satellite visant la Terre

(3-5μm, aussi appelée MWIR pour mid-wave IR) et III (8-12 μm ou LWIR pour long-wave IR).

L'infrarouge a de larges applications aussi bien militaires/sécurité (détection des activités humaines, vision nocturne, guidage et détection de missiles...) que civiles (analyse de l'air et détection des polluants par spectroscopie IR, météorologie, astronomie, médical,...)

Dans la suite de cette thèse, je vais m'intéresser au potentiel des structures à base de plasmons de surface pour l'optique infrarouge. D'une part pour améliorer les caractéristiques des détecteurs infrarouges avec des structures plasmoniques concentrant la lumière et permettant ainsi un confinement sub-longueur d'onde de l'absorption. D'autre part, il est également possible d'ajouter de nouvelles fonctionnalités comme une signature spectrale du pixel. Enfin, les travaux présentés dans cette thèse ont également pour visée la conception de composants micro-optiques. Je me concentre dans la suite de cette thèse au domaine de l'infrarouge, les propriétés des plasmons dans cette gamme spectrale vont maintenant être décrites.

1.2.2 Longueur de propagation et confinement du champ

Lorsqu'on prend en compte les pertes dans le métal, la permittivité du métal à une fréquence donnée devient complexe $\epsilon_m = \epsilon'_m + i\epsilon''_m$, ce qui se traduit dans le modèle de Drude par l'introduction d'un terme γ de pertes : $\epsilon_m = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}$. D'après l'équation 1.9, le vecteur d'onde du plasmon de surface sera également complexe $k_x = k'_x + ik''_x$. Si on considère que

$|\epsilon'_m| \gg \epsilon''_m$ et que $\epsilon''_m \ll \left|\epsilon'_m + \frac{\epsilon'^2_m}{\epsilon_d}\right|$, on a :

$$k'_x = k_0\sqrt{\frac{\epsilon'_m\epsilon_d}{\epsilon'_m + \epsilon_d}} \tag{1.12}$$

$$k''_x = k_0\left(\frac{\epsilon'_m\epsilon_d}{\epsilon'_m + \epsilon_d}\right)^{3/2}\frac{\epsilon''_m}{2\epsilon'^2_m} \tag{1.13}$$

Les pertes dans le métal ont pour conséquence directe l'atténuation du plasmon suivant la direction x. La décroissance de leur intensité est liée au terme $\exp(-2k''_x x)$, et on peut définir la longueur de propagation δ_{SP} du plasmon de surface :

$$\delta_{SP} = \frac{1}{2k''_x} = \frac{1}{k_0}\left(\frac{\epsilon'_m + \epsilon_d}{\epsilon'_m\epsilon_d}\right)^{3/2}\frac{\epsilon'^2_m}{\epsilon''_m} \tag{1.14}$$

Le plasmon de surface est également évanescent suivant l'axe z, les longueurs caractéristiques de ce confinement sont données par les valeurs de la composante z du vecteur d'onde dans chacun des milieux :

$$\delta_{zi} = \frac{1}{2|k''_{zi}|}. \tag{1.15}$$

où k''_{zi} est la partie imaginaire de la composante du vecteur d'onde donnée dans chaque milieu par :

$$k_{zi} = \sqrt{\epsilon_i k_0^2 - k_x^2}. \tag{1.16}$$

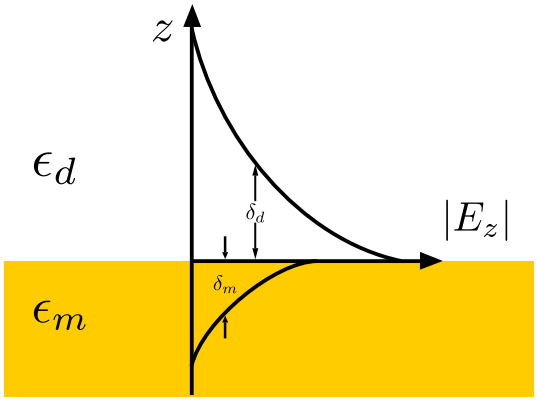

FIGURE 1.5 – Le plasmon de surface est évanescent dans la direction perpendiculaire à l'interface diélectrique métal. Les longueurs caractéristiques de décroissance sont δ_{zd} dans le diélectrique, qui est de l'ordre de la longueur d'onde et δ_{zm} est lié à l'épaisseur de peau.

Dans la figure 1.5, on représente schématiquement les grandeurs caractéristiques du plasmons δ_{zd} et δ_{zm}. Dans l'infrarouge, comme montrée dans la figure 1.6a, le plasmon va pénétrer typiquement dans 30 nm de métal (épaisseur de peau du métal) alors qu'il s'étendra sur

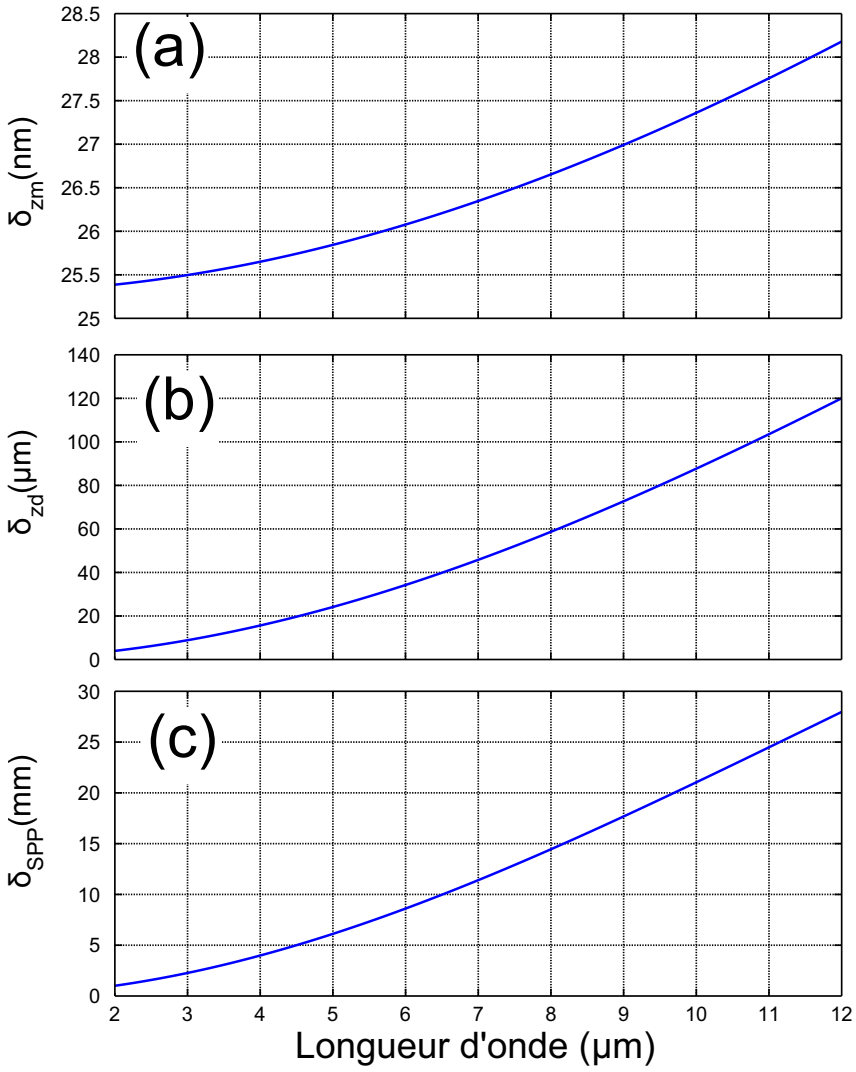

FIGURE 1.6 – (a) Épaisseur de peau du plasmon de surface excité sur une interface air/or dans l'infrarouge. L'épaisseur de peau dans le métal varie très faiblement de 25 à 28 nm dans l'infrarouge
(b) Épaisseur de peau du plasmon dans l'air, qui est typiquement 3 ordres de grandeurs plus grand que dans le métal.
(c) Longueur de propagation du plasmon de surface dans l'infrarouge sur une interface air/or.

plusieurs dizaines de microns dans l'air. La valeur de δ_{zd} dépend fortement de la longueur d'onde considérée, comme le montre la figure 1.6b. L'épaisseur de peau du métal est un paramètre clé pour la conception de nanostructures métalliques, déterminant la prédominance de certains effets de résonance (couplage de plasmons à travers un mur métallique suffisamment fin par exemple). Sur la figure 1.6c, on trace l'évolution de la longueur de propagation du plasmon de surface sur une interface air/or dans l'infrarouge. Plus on va vers les grandes longueurs d'onde, plus le métal est parfait et donc les pertes faibles et la longueur de propagation est grande.

1.3 Excitation des plasmons et couplage à un réseau

1.3.1 Nécessité d'un couplage entre les plasmons de surface et les photons

Pour exciter les plasmons de surface avec une onde plane, il faut satisfaire simultanément aux conditions de conservation de l'énergie (ω) et de la quantité de mouvement (vecteur d'onde k), équivalente à une condition d'accord de phase. Or, d'après l'équation 1.9, le vecteur d'onde du plasmon de surface est toujours plus grand que le vecteur d'onde de la lumière dans l'espace libre $k_{SPP} > k_0$. On peut également le visualiser sur la figure 1.2, où la ligne de lumière ω/c ne croise jamais la courbe de dispersion des plasmons de surface, même si elles sont très proches pour les faibles énergies.

Il n'est donc pas possible d'exciter les plasmons de surface sur une interface plane quelle que soit la longueur d'onde de la lumière incidente. Pour satisfaire la condition de conservation de la quantité de mouvement, il faut augmenter le vecteur d'onde du photon. Il est nécessaire d'utiliser un système de couplage qui va permettre d'accorder le vecteur d'onde du photon incident de telle sorte qu'il puisse exciter des modes plasmoniques.

1.3.2 Dispositifs coupleurs

On peut distinguer deux techniques d'excitation contrôlée d'un SPP. La première technique de couplage consiste à exciter les plasmons de surface grâce aux ondes évanescentes créées en envoyant la lumière sur un milieu diélectrique d'indice supérieur à 1. Les configurations les plus célèbres, basées sur la réflexion interne totale dans un prisme, sont celles de Otto[9] et Kretschmann-Raether[10] décrites dans la figure 1.7. En effet, en situation de réflexion totale sur une interface, il existe une onde évanescente de l'autre côté de l'interface ; la composante du vecteur d'onde parallèle à l'interface dépend de la permittivité du diélectrique $k_x = \sqrt{\epsilon_d} k_0 \sin\theta$. Elle est donc plus grande que dans l'air, et peut satisfaire à la condition d'accord de phase pour l'excitation d'un SPP à une interface métal/air. Dans la configuration d'Otto, le prisme est placé au voisinage immédiat d'une interface métal/air. L'onde évanescente à l'interface prisme/air va se coupler au SPP sur la surface métallique.

Dans la configuration de Kretschmann, la couche métallique est directement déposée sur le prisme. L'onde évanescente générée par le faisceau laser doit traverser la couche métallique pour exciter les plasmons à l'interface métal/air. L'épaisseur de métal est donc un paramètre critique dans cette configuration.

On peut également exciter les plasmons de surface en augmentant le vecteur d'onde au

[9] Otto, « Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection ».

[10] Kretschmann, « Die bestimmung optischer konstanten von metallen durch anregung von oberflächenplasmaschwingungen » ; Kretschmann et al., « Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light(Surface plasma waves excitation by light and decay into photons applied to nonradiative modes) ».

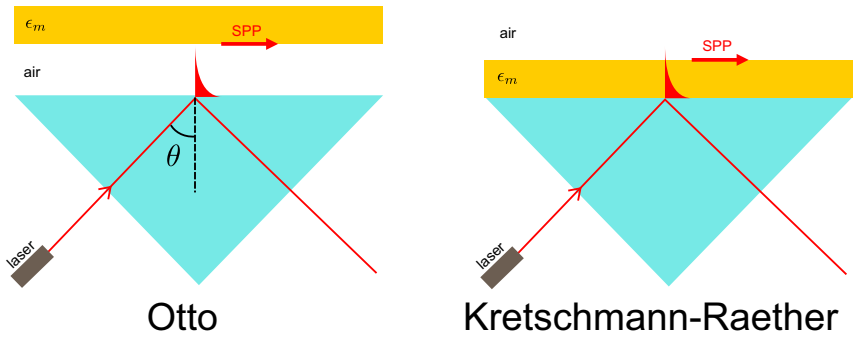

FIGURE 1.7 – A gauche, configuration d'Otto. Le faisceau laser incident est totalement réfléchi à l'intérieur du prisme, et en faisant varier l'angle d'incidence il va être possible d'exciter les plasmons à la surface du métal. A droite, configuration de Kretschmann-Raether.

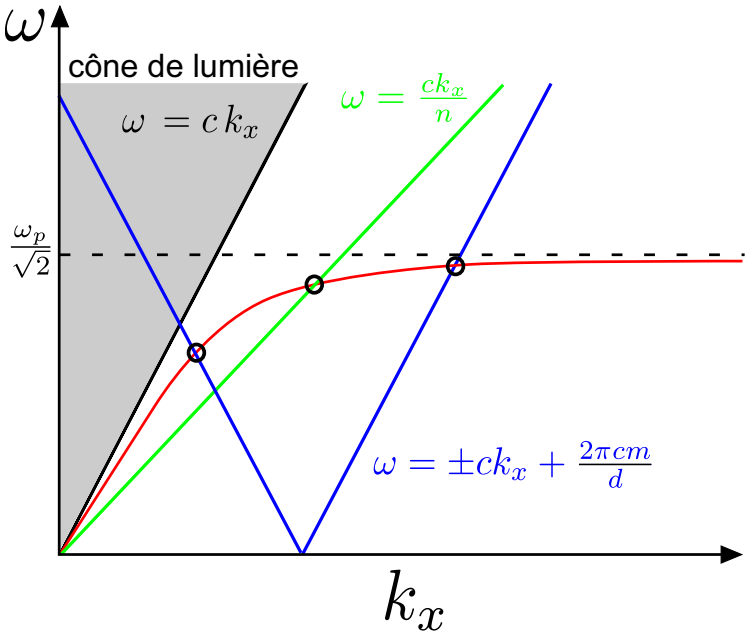

FIGURE 1.8 – Relation de dispersion des plasmons de surface et techniques de couplages. Les deux principales techniques pour exciter les plasmons consistent soit à coupler avec un réseau (courbe bleue), soit à se mettre dans la configuration d'Otto ou Kretschmann-Raether (courbe verte).

moyen d'une surface structurée comme un réseau. Dans ce cas, le vecteur d'onde est perturbé par le réseau et s'écrit :

$$k_x = k_0 + \frac{2m\pi}{d} \tag{1.17}$$

où m est un entier donnant l'ordre de diffraction et d est la période du réseau. Je reviendrai dans le chapitre 2 sur cette méthode d'excitation des plasmons de surface à l'aide de surfaces nanostructurées.

La figure 1.8 fait un résumé des différentes possibilités pour exciter les plasmons de

surface. Les droites bleues et vertes représentent les relations de dispersion des moyens de couplage.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit les principales propriétés des plasmons dans le domaine de l'infrarouge. Un plasmon de surface est un mode du champ électromagnétique couplant un photon à l'oscillation du gaz d'électrons à la surface d'un métal. Il est évanescent dans les deux milieux et se propage à l'interface métal/diélectrique. Si les plasmons de surface ont été découverts il y a plus d'un demi-siècle par Ritchie, il y a eu un regain d'intérêt depuis les travaux de Thomas Ebbesen dans les années 90[11] dans un tamis à photons (transmission extraordinaire) pour leur manipulation dans des matériaux nanostructurés. Les propriétés des SPP dépendent au premier ordre de celles du métal. Nous nous intéresserons à leurs propriétés dans l'infrarouge, domaine spectral où les métaux sont d'excellents conducteurs (faibles pertes), et où par ailleurs, les besoins en systèmes photoniques compacts sont en constante augmentation depuis une dizaine d'années.

[11] Ebbesen et al., « Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays ».

Chapitre 2 résonances plasmoniques

Sommaire

2.1 Les anomalies de Wood 19

2.1.1 Anomalies de Wood-Rayleigh 19

2.1.2 Anomalies de résonance 20

2.2 Les résonances de Fabry-Perot 21

2.2.1 Indice effectif 21

2.2.2 Résonance type Fabry-Perot 22

2.3 Conclusion 26

Dans le précédent chapitre, nous avons vu qu'une des techniques pour exciter les plasmons de surface est de structurer l'interface métal/diélectrique. Cette structuration permet de satisfaire aux conditions de quantité de mouvement et d'accord de phase, préalables nécessaires à l'excitation du plasmon. Dans le cas d'un réseau métallique (structuration périodique), ce sont les ordres diffractés qui vont permettre l'excitation du plasmon de surface. Je décris dans ce chapitre les différents types de résonances plasmoniques impliquées dans les réseaux métalliques. Le réseau permet en premier lieu d'exciter les plasmons à la surface du réseau, ce qui peut conduire à des résonances dépendantes de l'angle d'incidence et de la période. Par ailleurs, le couplage de plasmons à l'intérieur des fentes métalliques peut aussi conduire à des résonances de type Fabry-Perot indépendantes, quant à elles, de l'angle d'incidence.

2.1 Les anomalies de Wood

2.1.1 Anomalies de Wood-Rayleigh

En 1902, Wood observe des variations d'intensité importantes dans le spectre d'un réseau en réflexion. La distribution spectrale de la source était continue, ces phénomènes constituaient des anomalies qui n'étaient pas prévues par les théories classiques[1]. Il fut rapidement montré expérimentalement que ces effets sont liés à la périodicité du réseau et dépendent de la polarisation de la lumière incidente (il n'y a pas d'anomalies de Wood lorsque la lumière incidente est polarisée transverse électrique (TE)).

[1] Wood, « XLII. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum ».

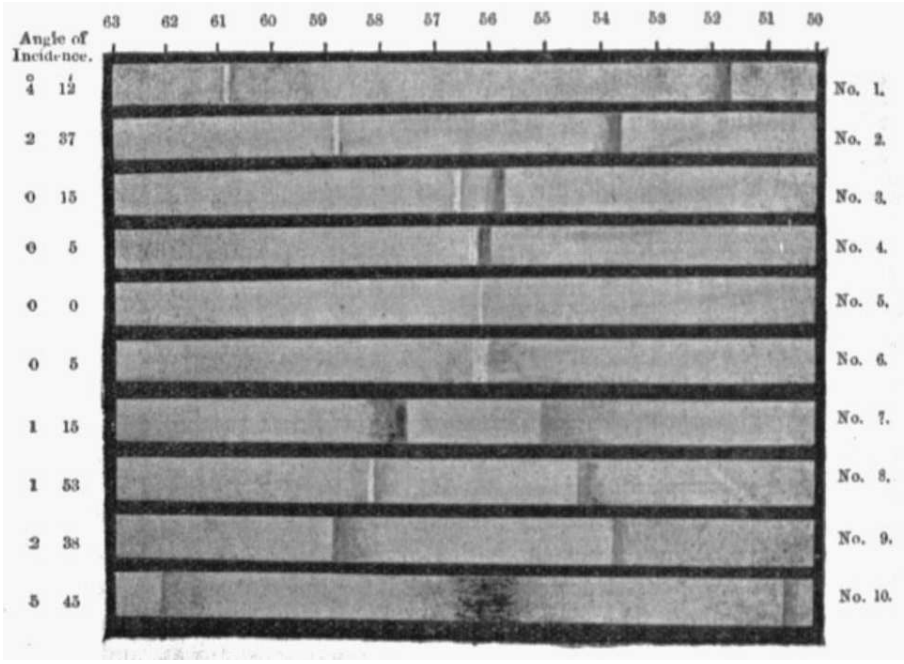

FIGURE 2.1 – Anomalies dans le spectre de réflexion d'un réseau, publié en 1902 dans l'article de Wood "On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum". L'angle d'incidence apparaît en ordonnée et l'angle de diffraction en abscisse.

Lord Rayleigh donne une première explication théorique de ces anomalies en 1907, en proposant une décomposition du champ électromagnétique qui porte aujourd'hui son nom. Il montre que la transformation d'un ordre de diffraction évanescent en ordre propagatif (ou réciproquement) est responsable d'anomalies de transmission qui correspondent aux longueurs d'onde trouvées par Wood[2] lorsque :

$$k_0 = \left| k_x + m\frac{2\pi}{d} \right| \tag{2.1}$$

où m est l'ordre de diffraction, d la période du réseau, k_0 le vecteur d'onde incident dans l'air et k_x sa composante suivant x.

Si la théorie de Rayleigh prédit correctement une partie des résultats obtenus par Wood, elle n'explique pas la forme de ses spectres de réflexion.

2.1.2 Anomalies de résonance

C'est en 1941 que Ugo Fano montre que des ondes de surface sont mises en jeu dans ces phénomènes[3], il distingue deux types d'anomalies, une anomalie fine et une anomalie plus

[2] RAYLEIGH, « On the dynamical theory of gratings ».
[3] FANO, « The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves) ».

large composée d'un minimum et d'un maximum. Mais il n'explique toujours pas la forme des spectres obtenus par Wood (*i.e.* un maximum proche d'un minimum de réflexion). En 1965, Hessel et Oliner distinguent deux types d'anomalies[4]. Les anomalies de Wood-Rayleigh expliquées précédemment par l'apparition ou disparition d'ordres diffractés d'une part, et les anomalies dues à des résonance qui mettent en jeu des ondes de surface d'autre part, *i.e.* les plasmons de surface introduits par Ritchie en 1957[5]. Comme indiqué en 1.3, une onde plane incidente ne peut pas exciter directement les plasmons de surface car le vecteur d'onde de la lumière incidente est plus petit que le vecteur d'onde des plasmons de surface $k_0 < k_{spp} = k_0 \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\epsilon_m}+1}}$ dans le cas d'une interface air/métal.

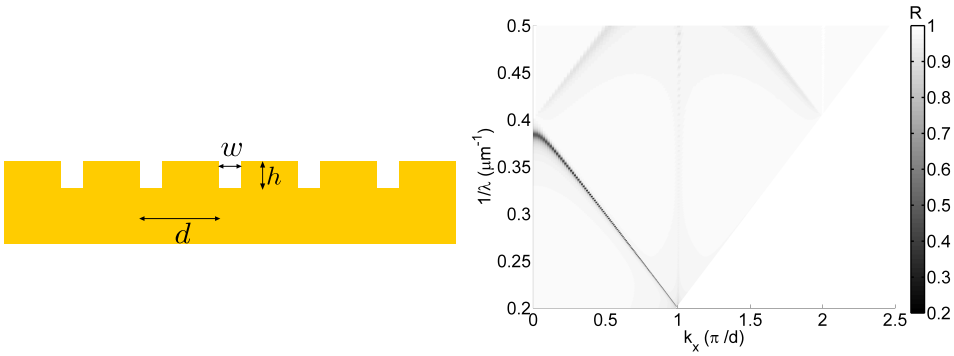

FIGURE 2.2 – Diagramme de diffraction d'un réseau en or de période $d = 2.5\mu$m, de largeur de fente $w = 0.5\mu$m et de hauteur $h = 200$nm.

Dans le cas de réseaux, les plasmons peuvent être excités sur la surface métallique si l'une des ondes diffractées par le réseau a un vecteur d'onde permettant d'exciter le vecteur d'onde du plasmon de surface :

$$k_x^{(n)} = k_x^{(0)} + \frac{2m\pi}{d} \tag{2.2}$$

L'excitation de ces plasmons de surface sur les surfaces du réseau provoquent des phénomènes de résonances à certaines longueurs d'onde qui dépendent à la fois de la période du réseau d et de l'angle d'incidence et peuvent conduire à une absorption totale[6]. La dépendance angulaire de cette résonance est illustrée sur la figure 2.2, pour un réseau de période $d = 2.5\mu$m, de largeur de fente $w = 500$nm et de hauteur $h = 200$nm.

2.2 Les résonances de Fabry-Perot

2.2.1 Indice effectif

Dans un réseau épais de fentes métalliques, des plasmons vont non seulement se propager sur les interfaces horizontales, mais également à l'intérieur des fentes, sur les interfaces verticales

[4] HESSEL et al., « A new theory of Wood's anomalies on optical gratings ».
[5] RITCHIE, « Plasma losses by fast electrons in thin films ».
[6] HUTLEY et al., « The total absorption of light by a diffraction grating ».

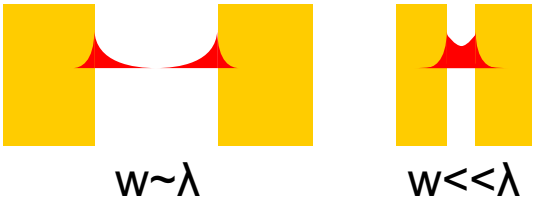

FIGURE 2.3 – Illustration du couplage entre plasmons dans une fente métallique remplie de diélectrique. Lorsque les fentes sont assez larges, le couplage est faible et l'indice effectif des modes propagatifs va être proche de celui du diélectrique.

(voir figure 2.3). Le couplage de ces plasmons crée un mode qui se propage avec un indice effectif différent de l'indice du diélectrique présent dans la fente. Cet indice effectif dépend de la largeur de la fente et du métal composant le réseau. Il est donné au premier ordre par[7] :

$$n_{\text{eff}} = n\left(1 + \frac{\delta}{w}\right) \tag{2.3}$$

où n est l'indice du diélectrique dans la fente, δ est l'épaisseur de peau et w est la largeur de la fente.

A partir de cette expression de l'indice effectif, on voit qu'on peut faire de l'ingénierie de l'indice en faisant varier la largeur de la fente ou bien l'indice du diélectrique dans la fente. La figure 2.4 illustre les indices artificiels qu'on peut obtenir pour différentes combinaisons de largeurs de fente et de matériaux. Lorsque la fente est assez large, le couplage est très faible et $n_{\text{eff}} \simeq n_{\text{dielec}}$, mais l'indice effectif devient sensiblement supérieur à n_{dielec} lorsque la largeur de fente est inférieure à 200nm.

Le couplage des plasmons dans la fente conduit à une rupture d'impédance entre l'intérieur de la fente et les milieux d'entrée et de sortie induit des résonances de type Fabry-Perot dans la fente que je vais décrire dans la suite.

2.2.2 Résonance type Fabry-Perot

Pour comprendre le phénomène de résonance de type Fabry-Perot, je commence par présenter un modèle analytique de la résonance. J'étudie ensuite l'influence des paramètres géométriques du réseau sur cette résonance.

Modèle analytique de la résonance

Si on considère le réseau de sillons métalliques sub-longueur d'onde de la figure 2.5, avec $w \ll d$. On va étudier cette structure avec un modèle mono-mode[8]. On peut définir les coefficients de réflexion s_{11}, s_{22} et de transmission s_{12} et s_{21} entre la région semi-infinie 1

[7] COLLIN et al., « Waveguide modes in metallic nanoscale apertures: coupled surface plasmon polaritons and skin depth effects ».
[8] LALANNE et al., « One-mode model and Airy-like formulae for one-dimensional metallic gratings ».

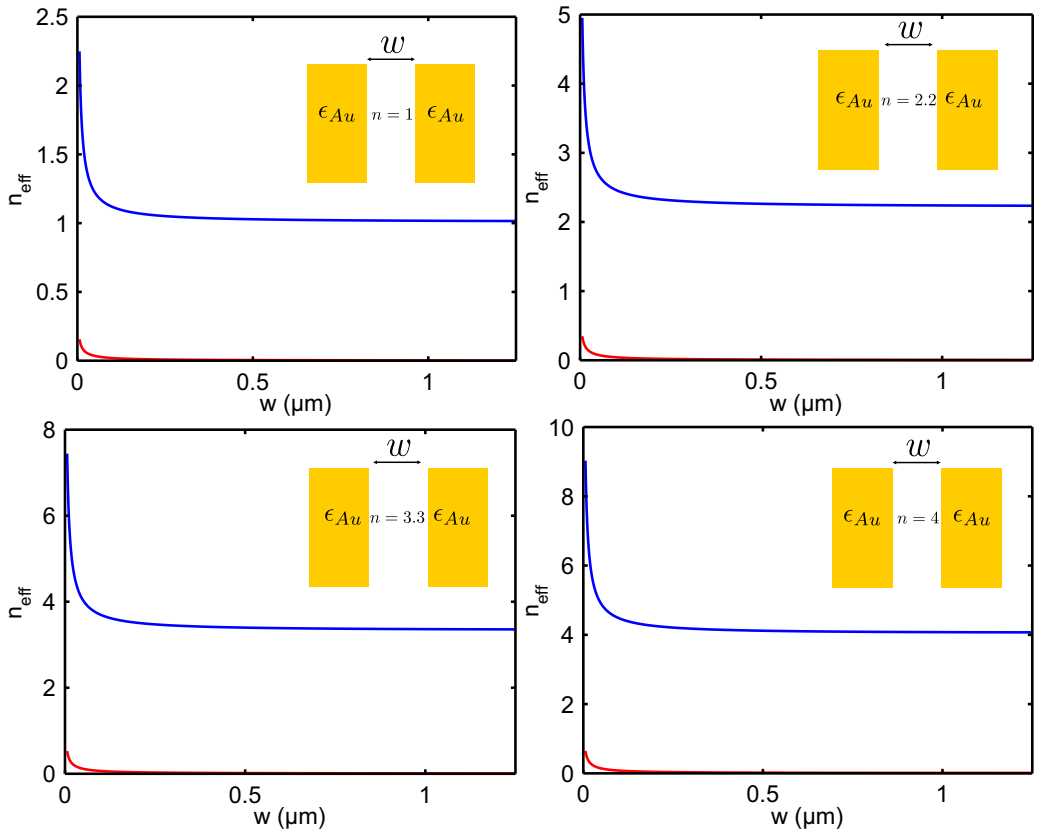

FIGURE 2.4 – Indice effectif à $\lambda = 4\mu$m dans une fente d'or remplie par différents matériaux diélectriques, de l'air ($n = 1$), du sulfure de zinc ($n = 2.2$), de l'arséniure de gallium ($n = 3.3$) et du germanium ($n = 4$) en fonction de la largeur de fente. La partie réelle de l'indice est en bleue et la partie imaginaire est en rouge.

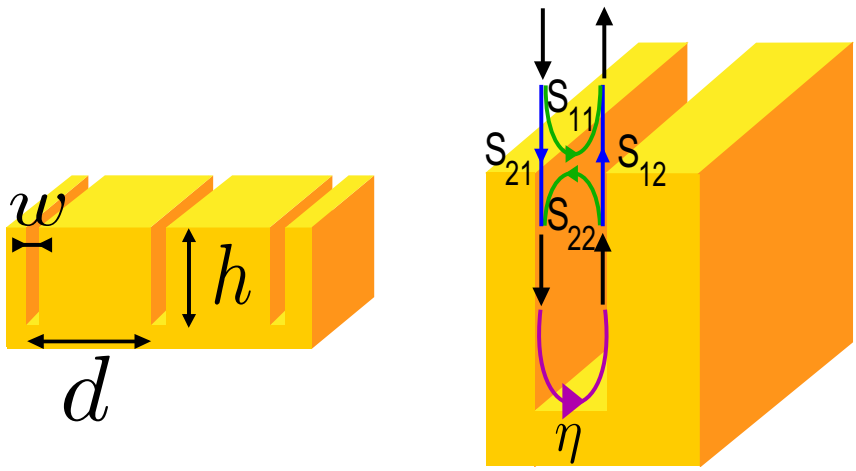

FIGURE 2.5 – Mécanisme simplifiée dans une fente non débouchante .

composée d'air et la fente dans la couche métallique 2. Dans les deux régions, il y a une onde descendante et une onde ascendante représentées par deux flèches noires. En prenant

compte de la résonance à l'intérieur du sillon, on peut exprimer la réflexion du réseau de sillons :

$$r = \frac{s_{11}(1 - \eta s_{22}) + s_{12}s_{21}\eta}{1 - \eta s_{22}} \tag{2.4}$$

où η correspond au terme d'aller-retour du mode propagatif dans la fente et de réflexion au fond de la fente $\eta = \rho \exp(\frac{4i\pi n_{eff} h}{\lambda})$. Un sillon se comportant comme un résonateur de type Fabry-Perot, il va être possible d'obtenir un zéro de réflectivité même si la quasi-totalité de la surface est un miroir métallique. L'équation 2.4 va donner la condition :

$$r = 0 = s_{11}(1 - \eta s_{22}) + s_{12}s_{21}\eta \tag{2.5}$$

Cette équation peut se réécrire comme :

$$\rho \exp(\frac{4i\pi n_{\text{eff}} h}{\lambda}) = \frac{s_{11}}{s_{11}s_{22} - s_{12}s_{21}} \tag{2.6}$$

Si on veut que la résonance ait lieu à une longueur d'onde λ_0, il faut alors jouer sur la géométrie du résonateur. Si le métal et le diélectrique dans le sillon sont fixés, l'indice effectif et le terme $\eta = \frac{s_{11}}{s_{11}s_{22} - s_{12}s_{21}}$ vont dépendre uniquement de la largeur w du sillon.

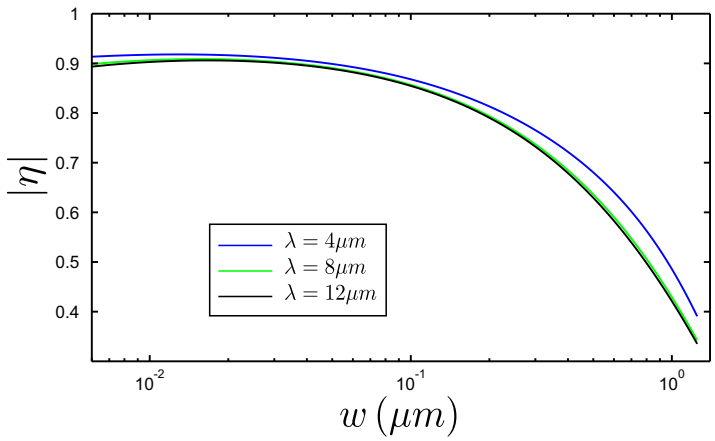

FIGURE 2.6 – Évolution du terme η en fonction de la largeur du sillon dans de l'or pour 3 longueurs d'onde dans un réseau de période 2.5μm où les fentes sont remplies d'air.

Nous étudions dans la figure 2.6 la dépendance de η en fonction de la longueur d'onde et de la largeur du sillon dans le cas d'un réseau de période 2.5μm (mais la période n'a pas d'influence sur la résonance tant que les sillons sont indépendants, *i.e.* $d - w \gg \delta_m$). Le terme η ne dépend quasiment pas de la longueur d'onde.

Influence des paramètres géométriques sur la résonance

Je vais maintenant m'intéresser à l'influence des paramètres géométriques de la structure sur la résonance pour confirmer qu'elle se comporte bien comme une résonance de type Fabry-Perot.

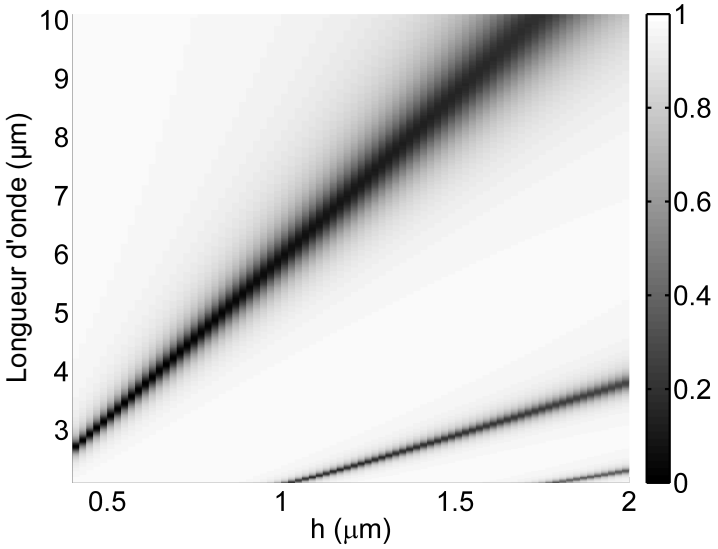

FIGURE 2.7 – Carte de réflectivité en fonction de la profondeur de la fente ($w = 56$nm et $d = 2\mu$m). L'onde arrive sur le réseau en incidence normale et polarisée TM.

La dépendance de la résonance en fonction de la profondeur du sillon h est étudiée dans la carte de réflectivité tracée dans la figure 2.7. La largeur du sillon $w = 56$nm et la période du réseau $d = 2\mu$m restent constantes. L'onde incidente est polarisée TM et a un angle d'incidence $\theta = 0°$. Trois lignes d'absorption totale de la lumière sont visibles sur cette carte, elles correspondent aux trois premiers ordres de résonance dans le sillon. Leurs position en fonction de la profondeur du sillon est donnée par la loi $\lambda_m = 4hn_{\text{eff}}/(2m-1)+\phi$ où m est un entier correspondant à l'ordre de résonance, n_{eff} est l'indice effectif du mode guidé dans le sillon et ϕ est le décalage de longueur d'onde induit par la réflexion du mode guidé à l'interface entre le réseau et l'air.

Au premier ordre, l'indice effectif prend la forme de l'équation 2.3, $n_{\text{eff}} = 1 + \delta/w$. L'influence de la largeur du sillon sur la résonance est présentée dans la figure 2.8, et donne le résultat attendu (une dépendance en inverse de la largeur du sillon de la position de la résonance).

Enfin, nous vérifions que la période et l'angle d'incidence n'ont pas d'influence au premier ordre sur la résonance dans les figures 2.9 et 2.10. La carte de réflectivité en fonction de la période est tracée en gardant la profondeur et la largeur du sillon constantes ($h = 640$nm et $w = 56$nm). La résonance reste fixée à une longueur d'onde $\lambda = 4\mu$m.

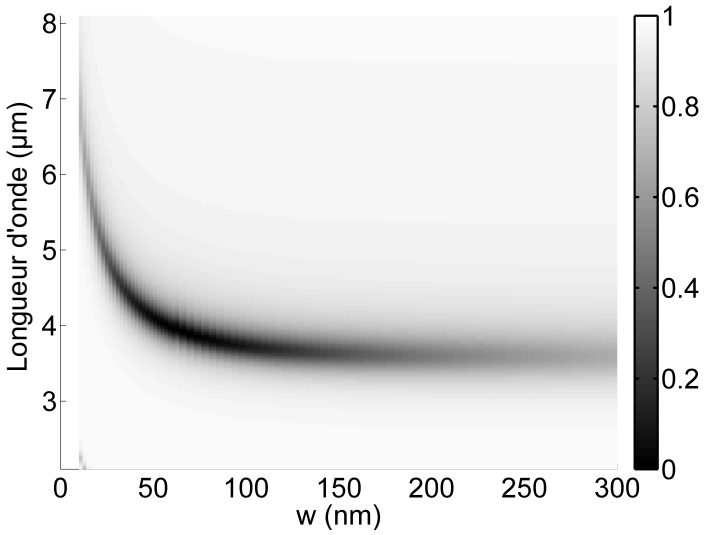

FIGURE 2.8 – Carte de réflectivité en fonction de la largeur du sillon (profondeur $h = 640$nm et période du réseau $d = 2\mu$m sont gardées constantes). L'onde arrive en incidence normale et polarisée TM.

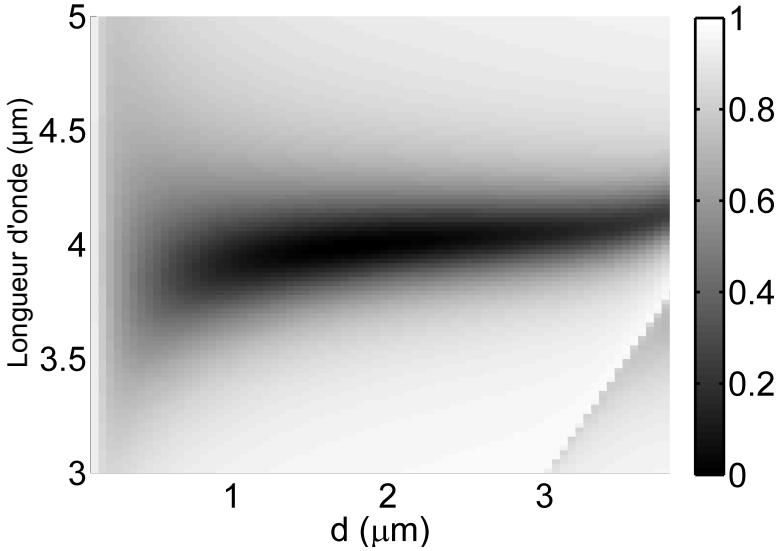

FIGURE 2.9 – Carte de réflectivité en fonction de la période du réseau. La largeur et la profondeur du sillon sont gardées constantes ($w = 56$nm and $h = 640$nm). L'onde arrive en incidence normale et polarisée TM.

2.3 Conclusion

J'ai décrit dans ce chapitre les deux principales catégories de résonances qui peuvent avoir lieu dans un réseau. La résonance liée à l'excitation des plasmons de surface va dépendre de la période du réseau et de l'angle d'incidence alors que la résonance de type Fabry-Perot

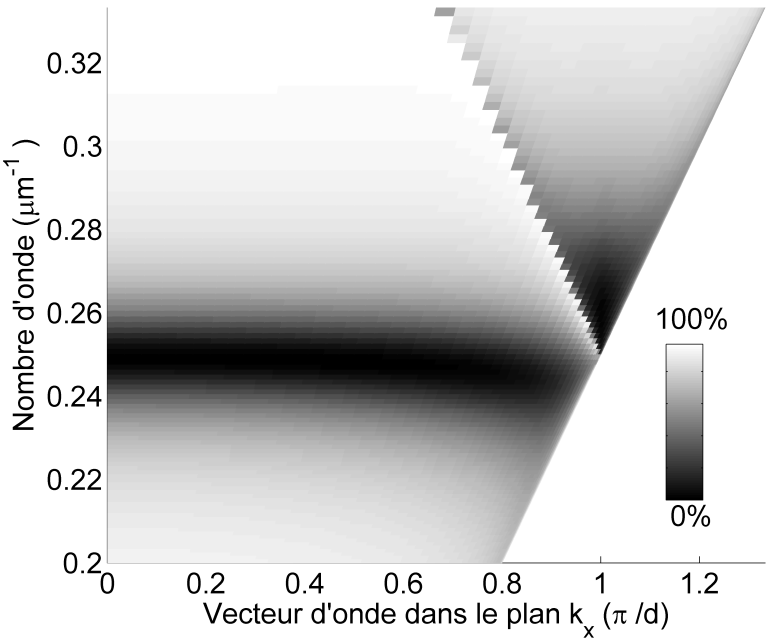

FIGURE 2.10 – Réflectivité spéculaire dans le plan (σ, k_x) pour le réseau de géométrie ($w = 56nm$, $d = 2\mu$m et $h = 640nm$). La résonance est indépendante de l'angle d'incidence.

va dépendre de la largeur et de la hauteur du motif. D'autres types de résonances peuvent avoir lieu dans des réseaux métalliques, comme des résonances de phase[9] ou des résonances liées à des modes hybridés dans le cas d'un couplage fort (voir chapitre 6). J'ai montré qu'un réseau de sillons dans de l'or présentait une résonance menant à une absorption totale. Ce phénomène est bien expliqué par une résonance de type Fabry-Perot dans le sillon et par un modèle analytique de l'indice effectif. Cette structure concentre et absorbe le champ dans un volume très sub-longueur d'onde, ce qui représente un intérêt crucial pour la détection infrarouge. Dans le chapitre suivant, je vais m'intéresser à la fabrication et la caractérisation optique d'un tel réseau.

[9] SKIGIN et al., « Transmission resonances of metallic compound gratings with subwavelength slits ».

Deuxième partie

Etude de résonateurs plasmoniques

Chapitre 3 Etude théorique et expérimentale de nanorésonateurs plasmoniques

Sommaire

3.1 Dimensionnement d'un nanorésonateur plasmonique à grand rapport d'aspect dans l'infrarouge . . . 32

3.2 Fabrication . . . 34

3.2.1 Utilisation d'un moule cristallin . . . 34

3.2.2 Procédé de fabrication . . . 37

3.3 Caractérisation optique de la structure . . . 41

3.3.1 Description du montage . . . 41

3.3.2 Caractérisation optique et simulations . . . 41

3.4 Conclusion . . . 42

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, il existe plusieurs catégories de résonateurs plasmoniques et je m'intéresse ici aux résonateurs basés sur un empilement métal / isolant / métal (MIM). Ce résonateur peut être soit horizontal[1], soit vertical[2] (voir figure 3.1). Ces structures MIM sont le siège de résonances de type Fabry-Perot, qui sont

Figure 3.1 – Les deux types de résonateurs MIM. Dans ce chapitre, nous étudierons en particulier le résonateur MIM vertical correspondant à un sillon à grand rapport d'aspect .

donc indépendantes de l'angle d'incidence.

Dans ce chapitre, je vais décrire nos travaux de dimensionnement, de fabrication et de caractérisation d'une structure MIM vertical, *i.e.* un réseau de sillons. Pour obtenir

[1] Hao et al., « High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial » ; Hao et al., « Nearly total absorption of light and heat generation by plasmonic metamaterials » ; Le Perchec et al., « Plasmon-based photosensors comprising a very thin semiconducting region » ; Lévêque et al., « Tunable composite nanoparticle for plasmonics ».

[2] Bonod et al., « Total absorption of light by lamellar metallic gratings » ; Garcia-Vidal et al., « Transmission and focusing of light in one-dimensional periodically nanostructured metals » ; Le Perchec et al., « Why metallic surfaces with grooves a few nanometers deep and wide may strongly absorb visible light » ; Popov et al., « Absorption of light by extremely shallow metallic gratings: metamaterial behavior ».

des résonances dans l'infrarouge, avec une absorption totale de la lumière, les sillons du réseau métallique ont un grand rapport d'aspect (largeur typique de 100 nm et profondeur typique de 1 μm). Fabriquer des sillons de grand rapport d'aspect dans du métal est un défi technologique. Les techniques classiques de structuration d'une couche métallique comme le lift-off ou le faisceau d'ions focalisé ne sont pas adaptées aux contraintes d'une telle fabrication :

* Ouverture nanométrique ($w < 150$nm)

* Sillon profond ($h > 1\mu$m)

* Structuration sur une large surface (> 4mm^2)

Pour fabriquer ces structures, j'ai développé une technique basée sur un moule sacrificiel sur lequel est fait une croissance électrolytique. Par ailleurs, on peut se demander si le fait de structurer quelques pourcents d'une surface métallique qui se comporte comme un miroir quasi-parfait peut en pratique conduire à une absorption totale. Cette structure peut être vu comme un matériau avec un indice artificiel très élevé, autrement dit un métamatériau[3]. L'approche métamatériau de réseaux métalliques a été abordée théoriquement dans la littérature[4], et je valide et complète cette démarche expérimentalement dans le chapitre 5. Enfin, nous le verrons, à la résonance, l'absorption se fait en théorie dans les parois métalliques du sillon et le mécanisme par lequel l'énergie de l'onde incidente à une longueur d'onde λ est concentrée dans une ouverture de dimension $\lambda/70$ reste à élucider. Je décris ce mécanisme dans le chapitre 4.

3.1 Dimensionnement d'un nanorésonateur plasmonique à grand rapport d'aspect dans l'infrarouge

La structure à laquelle nous allons nous intéresser dans ce chapitre et une partie des suivants est un réseau, de période d, de sillons fins et profonds dans une couche métallique schématisé dans la figure 3.2. Le sillon de largeur w et de profondeur h va se comporter comme un résonateur de type Fabry-Perot vertical. La position des pics de résonances est à peu près donnée par la formule

$$\lambda_m \simeq 4n_{\text{eff}}h/(2m+1) \tag{3.1}$$

où m est un nombre entier et n_{eff} est l'indice effectif dans le sillon. Cet indice effectif dépend au premier ordre de la largeur du sillon $n_{\text{eff}} = 1 + \delta/w$ où δ est l'épaisseur de peau du métal (typiquement 25nm dans l'infrarouge). Le couplage entre les plasmons sur les parois métalliques conduisent à une augmentation de l'indice effectif, on se référera au chapitre 2 pour plus de détails à ce propos.

L'équation 3.1 explicite l'influence des différents paramètres géométriques sur la réso-

[3] Pendry et al., « Mimicking surface plasmons with structured surfaces » ; Shalaev, « Optical negative-index metamaterials ».

[4] Shen et al., « Mechanism for designing metallic metamaterials with a high index of refraction ».

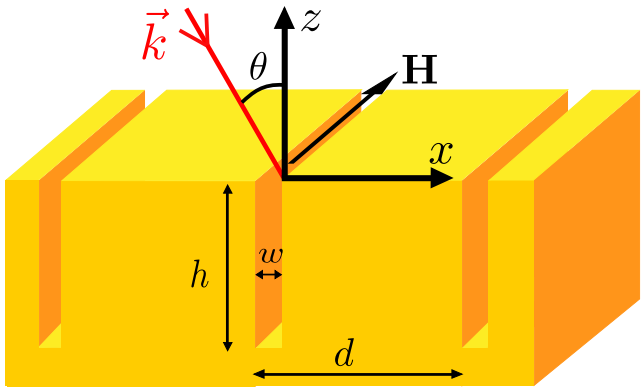

FIGURE 3.2 – Réseau de sillons dans une couche métallique de période d, de largeur w et de profondeur h. L'onde arrivant sur le réseau est polarisée TM et incidente avec un angle θ.

nance. La profondeur est le paramètre le plus simple à manipuler pour positionner le pic de résonance. Mais on peut également jouer sur la largeur du sillon même si la plage de longueurs d'onde ainsi atteinte pour une profondeur fixée est plus restreinte. Enfin, la période joue un rôle mineur, elle modifie la condition de déphasage de l'onde qui se réfléchit à l'intérieur du sillon, et peut donc décaler légèrement la position des résonances. Par contre, la période joue un rôle important dans le cas particulier où les plasmons de surface sont excités à la même longueur d'onde ($\simeq d$) que la résonance localisée dans le sillon. Dans cette situation, il y a apparition de modes hybridés, liés à un couplage fort, qui conduisent à des résonances aux propriétés différentes. Ce type de couplage est étudié en détail dans le chapitre 6.

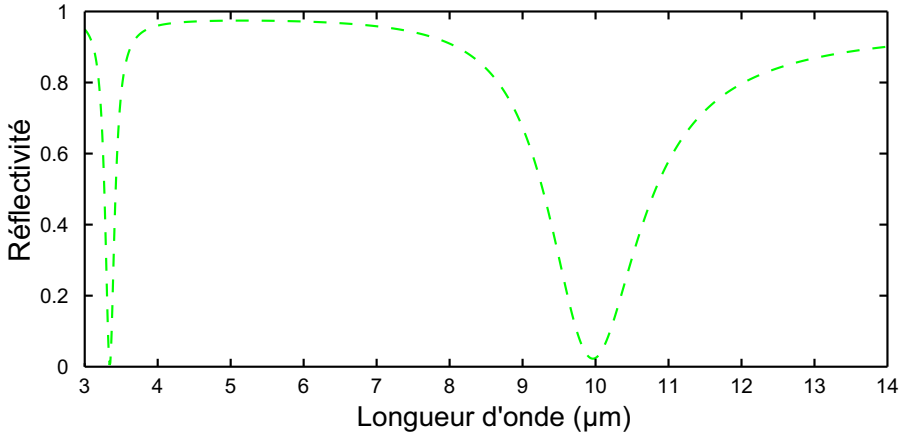

FIGURE 3.3 – Spectre du réseau dimensionné (période $d = 2.5\mu$m, largeur $w = 150$nm et profondeur $h = 2\mu$m) dans l'infrarouge pour une onde en incidence normale polarisée TM. Cette structure est un absorbant parfait bi-bande, les deux pics d'absorption (à $\lambda = 3.3\mu$m et à $\lambda = 10\mu$m) sont de plus indépendants de l'angle d'incidence.

A partir de l'équation 3.1, il est possible d'optimiser une structure qui présente une absorption totale à la fois dans la bande 2 ($3 - 5\mu$m) et dans la bande 3 ($8 - 12\mu$m). Ces

deux pics d'absorption sont liés aux résonances de l'ordre un ($m = 0$ dans l'équation 3.1) et de l'ordre trois ($m = 1$) dans le sillon. J'ai dimensionné un réseau de période $d = 2.5\mu$m avec des sillons de profondeur $h = 2\mu$m et de largeur $w = 150$nm qui permet d'obtenir une absorption totale dans les bandes II et III à $\lambda = 3.3\mu$m et à $\lambda = 10\mu$m. Le spectre de réflectivité de cette structure, calculé avec la méthode modale B-spline (décrite dans le chapitre 7), est présenté dans la figure 3.3. On s'attend à ce que les deux résonances soient indépendantes de l'angle d'incidence. Par ailleurs, le facteur de qualité de ces résonances est typiquement de l'ordre de 10.

Dans la suite, nous allons confirmer expérimentalement ces prévisions théoriques, en fabriquant un réseau de sillons rectangulaires avec cette géométrie et en le caractérisant angulairement en réflectivité.

3.2 Fabrication

3.2.1 Utilisation d'un moule cristallin

Pour fabriquer des sillons dans une couche métallique, on peut penser à structurer directement une couche épaisse métallique. La première possibilité est de faire de la gravure par faisceau d'ions (IBE), mais les flancs produits sont obliques et non verticaux : il sera donc impossible de faire un sillon de profil rectangulaire à grand rapport d'aspect, surtout si on rajoute la contrainte sur la largeur de ce sillon ($w < 150$nm). On peut alors se tourner vers l'utilisation d'un faisceau d'ions focalisé (FIB)[5], technique qui est largement utilisée dans la littérature pour structurer un métal et ainsi réaliser des composants optiques comme les lentilles[6]. Dans ce cas précis, les sillons gravés font 80 nm de large et 400 nm de haut, et même s'il faut prendre en compte les problèmes liés à la redéposition, on pourrait l'envisager pour les sillons les moins profonds. Toutefois, avec la FIB, il faut graver les sillons les uns après les autres, ce qui explique pourquoi les dispositifs utilisant cette technique sont structurés sur une faible surface. Or, si on étudie la dépendance angulaire des propriétés optiques de l'échantillon en infrarouge, il faut une surface qui soit plus grande que le diamètre du faisceau du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR), typiquement supérieure à 9mm^2.

Puisqu'il n'est pas possible de structurer directement une couche métallique sur une grande surface, nous avons choisi l'alternative qui consiste à utiliser un moule qui va servir de base pour une croissance électrolytique. En premier lieu, nous avons étudié le potentiel de moules à base de résines optiques et d'une gravure sèche ionique (RIE), les résines électroniques ne permettant pas d'obtenir directement une épaisseur suffisante (supérieure à 500nm) tout en conservant une bonne résolution du motif (inférieure à 10nm).

Le procédé que j'ai développé est présenté dans la figure 3.4. Les premières étapes utilisent

[5] Gierak, « Focused ion beam technology and ultimate applications ».
[6] Verslegers et al., « Planar lenses based on nanoscale slit arrays in a metallic film ».

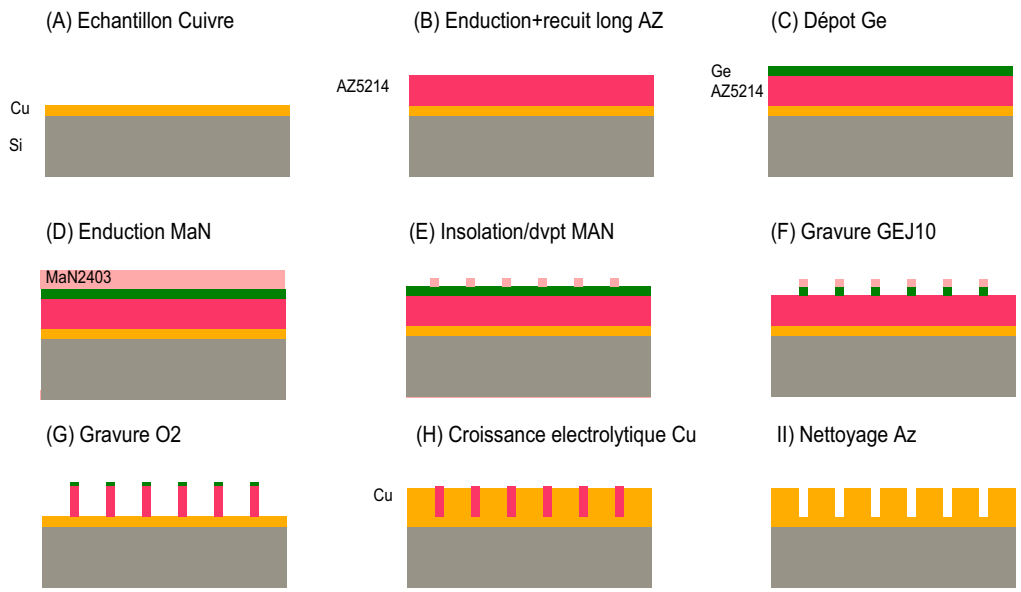

FIGURE 3.4 – Procédé de fabrication tricouche. (A) Substrat de silicium avec dépôt d'une couche de cuivre. (B) Enduction d'une résine optique AZ5214 et recuit long. (C) Dépôt d'une couche séparatrice de germanium. (D) Enduction d'une résine électronique négative MaN 2403. (E) Insolation et développement de la résine MaN 2403. (F) Gravure plasma fluoré du Germanium. (G) Gravure oxygène de la résine AZ5214 avec un masque en germanium, retiré à la fin de l'étape. (H) Croissance électrolytique de cuivre sur le moule en murs de résine. (I) Retrait du moule de résine.

un procédé précédemment développé au LPN appelé "tricouche". Son originalité consiste à structurer à une échelle très inférieure au micron une résine optique. On commence par déposer une couche de résine optique AZ5214 qui va être recuite pendant plusieurs minutes sur plaque ou plusieurs heures au four à 140°C. On dépose ensuite une couche de 100nm de Germanium en évaporation qui permet de transférer le masque électronique et sert également de séparation entre les deux résines. On utilise ensuite une résine électronique négative MaN2403 d'épaisseur 230nm après développement. Le choix de la résine négative se justifie par les motifs insolés (des lignes isolées), ce qui réduit le temps de l'insolation au masqueur électronique. Après développement, la résine sert de masque en gravure sèche ionique (RIE) fluorée pour la couche de Germanium, qui va elle-même servir de masque pour une RIE oxygénée anisotrope qui grave la résine AZ jusqu'à la couche de cuivre. Le masque de germanium est retiré ensuite dans une solution d'H_2O_2 et on obtient le réseau de murs de résine. Des photos au microscope électronique à balayage (MEB) sont présentées dans la figure 3.5. Les murs obtenus font 100nm de large pour 1.2μm de haut, et les flancs sont réguliers et droits.

La dernière étape du procédé consiste à faire un dépôt électrolytique sur le moule de résine obtenu. Des résultats d'une telle croissance sont présentés sur les images MEB de la figure 3.6. Les murs sont pour la plupart cassés ou sont tombés. Deux hypothèses peuvent expliquer ce phénomène. La première possibilité est que le réseau de mur n'a pas résisté lors

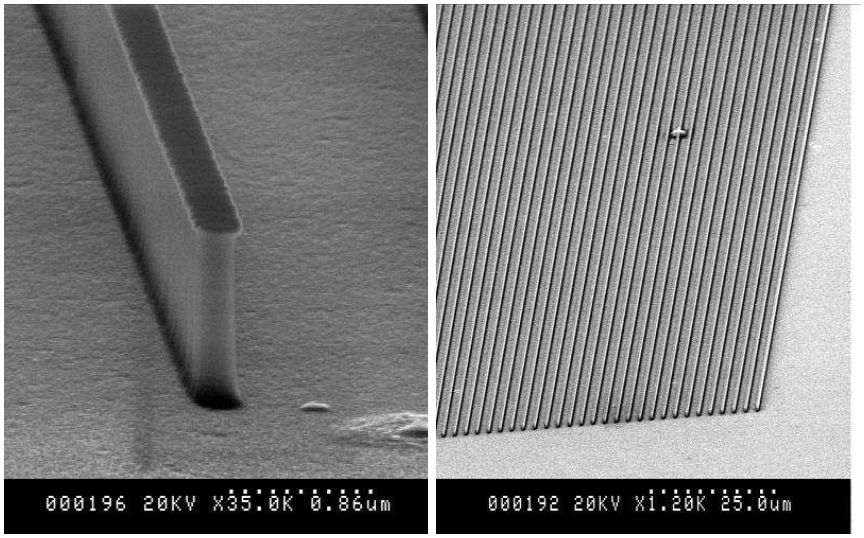

FIGURE 3.5 – Moule de murs en résine AZ 5214 à grand rapport d'aspect. Ce moule est obtenu par un procédé tricouche, permettant d'obtenir des murs de $100nm$ de large bien que la AZ5214 soit une résine optique.

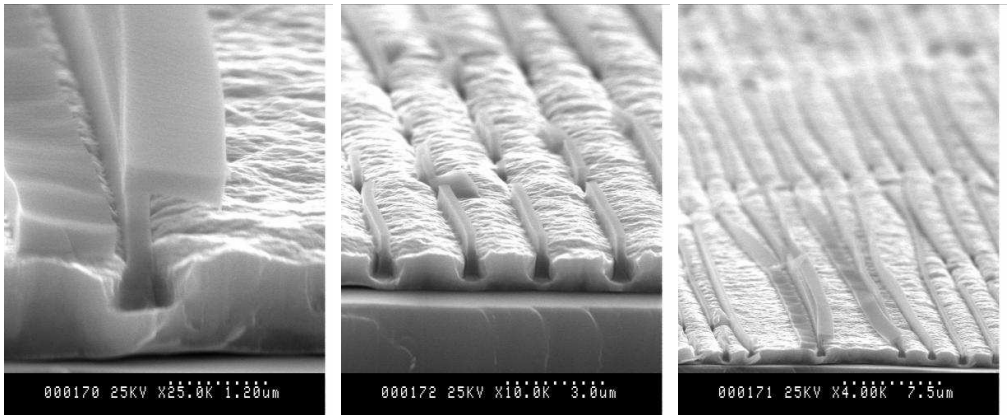

FIGURE 3.6 – Dépôt électrolytique sur le moule en résine précédent. Une grande partie des murs sont tombés, certainement lors de la mise en solution, ou bien se cassent lors de la croissance, ne résistant pas aux contraintes subies.

de la mise en solution de l'échantillon, les tensions de surface ont suffi à faire tomber les murs de résine. L'autre hypothèse est que le moule se soit cassé lors de la croissance, ne résistant pas aux pressions exercées par la couche métallique de cuivre. Nous avons envisagé d'utiliser d'autres résines, comme la résine AZ 15nXT qui sont dédiées à la croissance électrolytique. Cependant, dans le procédé tricouche, les conditions sont non standards pour les résines optiques, et les premiers tests de gravure de la résine AZ 15nXT en RIE oxygénée ont montré que celle-ci ne se grave pas complètement. Par ailleurs, cette résine est trop épaisse par rapport aux géométries visées (épaisseur minimum de 5μm). Nous avons choisi de laisser de côté ce procédé pour en développer un autre plus prometteur.

3.2.2 Procédé de fabrication

La conclusion du développement du précédent procédé est qu'il faut un moule solide, qui même structuré avec des murs de grand rapport d'aspect puisse résister aux contraintes de la croissance électrolytique. Nous avons donc choisi de structurer un matériau cristallin, l'arséniure de gallium (GaAs), pour obtenir le moule. Par ailleurs, en prenant du GaAs dopé, il est possible d'effectuer la croissance électrolytique d'or directement sur le substrat. Les étapes du procédé sont décrites dans la figure 3.7 et détaillées dans la suite.

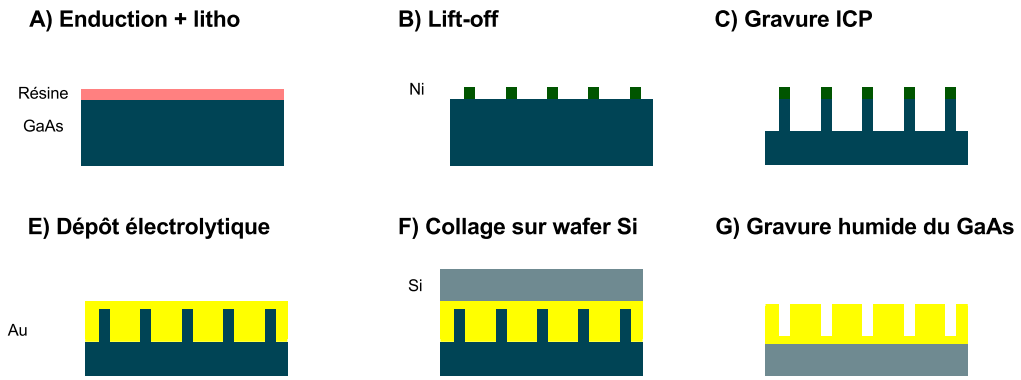

FIGURE 3.7 – (A) : le substrat de départ du procédé est de l'arséniure de gallium orienté 100, dopé n ($\simeq 0.8 - 4 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$). Une lithographie sur une résine PMMA A7 d'épaisseur 400 nm est faite. (B) : lift d'un masque bicouche de Titane (30nm) / Nickel (30nm). (C) : le GaAs est gravé en ICP. (D) : le masque est retiré par la gravure du titane dans de l'acide fluorhydrique. (E) : croissance électrolytique d'or

Lithographie électronique

La première étape du procédé consiste à faire une lithographie électronique. Pour cela, on va recouvrir l'échantillon d'une résine sensible aux électrons. En lithographie optique, les résines sont sensibles aux UV, mais il existe des résines comme les résines MaN qui sont sensibles à la fois aux électrons et aux UV. Dans notre cas, nous utilisons des résines acryliques PMMA (Poly(methyl methacrylate)) qui sont positives.

Le principe de la lithographie électronique consiste à transférer un motif défini sur l'échantillon grâce à un faisceau d'électrons. Le masqueur électronique le plus récent au LPN, et utilisé pour fabriquer les échantillons pour ce procédé, est un VISTEC EBPG 5000 plus. Il permet d'insoler les résines avec une précision de l'ordre du nanomètre, même si cette limite dépend fortement des conditions d'utilisation que nous allons décrire.

Lorsqu'on insole une résine, on choisit l'intensité du faisceau d'électrons, la quantité de charge surfacique voulue sur la surface insolée, qu'on appelle couramment dose et enfin la résolution du faisceau. Ces paramètres d'insolation définissent une fréquence qui ne doit pas

dépasser les 50 MHz (valeur liée à l'appareil), et qui s'exprime comme :

$$\text{Fréquence (en Hz)} = \frac{\text{Intensité (en nA)}}{(\text{Résolution (en cm)})^2 \times \text{Dose(en } \mu\text{C/cm}^2) \times 1000} \tag{3.2}$$

Ces paramètres définissent également le temps d'insolation, qu'on souhaite évidemment le plus court possible.

$$\text{Temps insolation (en s)} = \frac{\text{Surface (en cm}^2) \times \text{Dose(en } \mu\text{C/cm}^2) \times 1000}{\text{Intensité (en nA)}} \tag{3.3}$$

Lift-off

Le développement se fait dans une solution Méthyl iso-butyl cétone :Isopropanol (1 :3). Le mélange de ces deux produits est endothermique. Il faut donc, par souci de reproductibilité de cette étape, laisser la solution se remettre à température dans un bain à 20.5°C. L'échantillon est ensuite développé dans la solution pendant 1 minute 30s, puis rincé dans de l'isopropanol. Le lift-off doit se faire dans les heures suivant le développement : on fait un dépôt de 30 nm de titane et 30 nm de Nickel sur l'échantillon. L'échantillon est ensuite mis dans une solution de Diméthyl Sulfoxyde (DMSO) qui va permettre le décollage du métal déposé sur la résine (étape de lift-off), ne laissant que le masque de métal déposé sur le GaAs.

Gravure ICP

Le masque que nous avons déposé va permettre de fabriquer le moule formé de murs de GaAs. Pour cela, on utilise une gravure réactive ionique (RIE) qui consiste à créer un plasma de gaz ionisés à basse pression, dans lequel les ions sont accélérés par un champ électrique vers l'échantillon. Deux phénomènes sont impliqués dans la gravure de l'échantillon, le premier est physique, l'ion entre en collision avec la surface et pulvérise les atomes de surface. Le second phénomène est chimique, l'ion pouvant réagir chimiquement avec le matériau. Le masque de gravure est choisi pour qu'il n'y ait pas de réaction chimique avec les ions.

Nous utilisons un système de RIE particulier, où le plasma est généré à partir d'un couplage inductif et pas capacitif, appelé ICP (modèle Sentech SI500). Dans ce système, on utilise deux générateurs de puissance distincts, un générateur RF pour ioniser le gaz et un générateur ICP pour accélérer les ions. Il est possible d'obtenir des plasmas beaucoup plus denses dans un plasma d'ICP, ce qui conduit à des vitesses de gravure plus grandes que dans des RIE classiques.

Pour graver le GaAs, nous avons utilisé deux catégories de procédés : le premier basé sur un mélange de gaz BCl3/Cl2/Ar, le second sur un mélange HBr/O2.

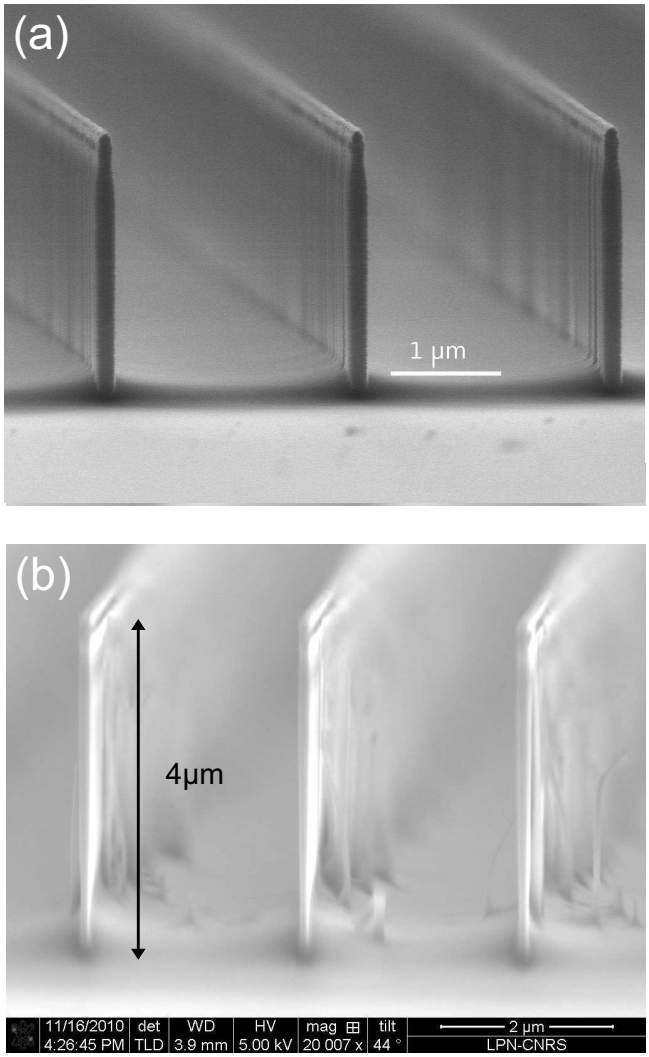

FIGURE 3.8 – (a) Vue de côté au MEB du réseau de murs d'arséniure de gallium gravé en ICP. Les murs font 150nm de large et 2μm de haut avec une période de 2.5μm. C'est ce réseau qui est utilisé dans la suite du procédé. (b) Image MEB d'un autre réseau de murs de GaAs obtenu, avec un rapport d'aspect $\simeq$ 40, qui donne une indication du degré de liberté encore disponible pour le procédé.

dépôt électrolytique

Le dépôt électrolytique se fait avec une solution commerciale (Metakem) de sulfite d'or à une température contrôlée autour de 45°C. On place l'échantillon dans la solution, avec une faible portion dépassant dans l'air pour pouvoir le contacter à l'électrode. Une électrode de référence est également placée en solution. La source de courant est un générateur SMU Keithley. Le dépôt se faisant directement sur le GaAs dopé, le début de cette étape dépend du niveau de dopage dans le GaAs et du temps qui se sera écoulé depuis la gravure ICP (formation d'oxyde). Par ailleurs, dès qu'on a déposé une fine couche d'or sur l'échantillon, il faut diminuer la tension pour conserver le même niveau de courant.

Report

Le report de la structure s'est fait en pratique avec de la cire (Sticky Wax) sur un substrat de silicium quelconque. Cette technique a l'avantage de la simplicité et de l'efficacité, mais elle souffre néanmoins de plusieurs défauts. Elle résiste mal aux fortes variations de température, ce qui fait que les échantillons vieillissent mal s'ils ne sont pas dans une atmosphère contrôlée, ce qui est sans doute également lié à la sensibilité de la cire à la température. Une alternative pour l'avenir serait d'utiliser un collage anodique, qui nécessite cependant, d'après les premiers tests effectués en ce sens, de polir le dépôt électrolytique d'or.

Retrait du substrat

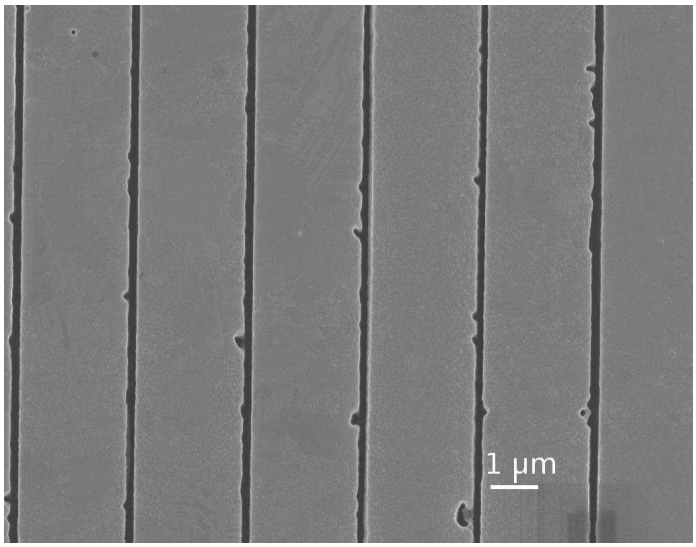

FIGURE 3.9 – Vue du dessus au MEB du réseau de sillons dans l'or. Des défauts ont été transférés du moule au réseau, mais ils ne sont qu'en surface et n'influent pas sur sa réponse optique.

Le retrait du substrat de GaAs se fait en solution dans un mélange d'acide et d'oxydant. Comme oxydant, on choisit toujours le H_2O_2, et différents acides ont été testés (H_2SO_4 et H_3PO_4). Le seul critère utilisé ici est d'avoir une solution qui grave rapidement les 370 μm de GaAs (vitesse de gravure $> 1\mu$m/min), la couche d'or n'étant pas attaquée.

La figure 3.9 montre une image faite au MEB d'un échantillon après le retrait du substrat. Des défauts dans les motifs sont visibles, mais ils ont en fait été transférés du moule et ne sont présents qu'en surface. Nous verrons que ces défauts n'ont pas de conséquence sur la réponse optique du réseau.

D'un point de vue dispositif, on pourrait imaginer laisser le GaAs dans les sillons, jouant alors le rôle d'absorbant, auquel cas il faudrait une couche d'arrêt qui pourrait être utilisée dans l'étape de gravure ICP également.

3.3 Caractérisation optique de la structure

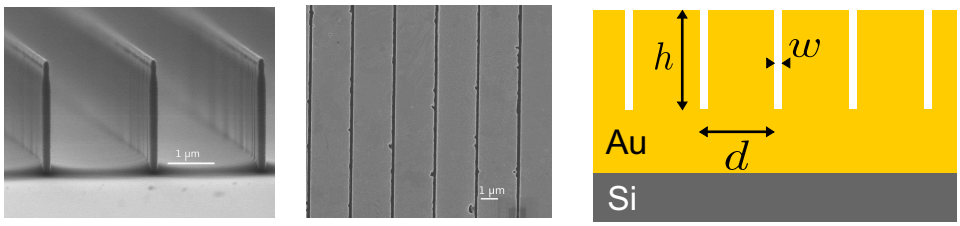

FIGURE 3.10 – Images MEB du moule et de l'échantillon final, permettant d'obtenir les paramètres géométriques indiqués sur le schéma du réseau ($h = 2\mu$m, $w = 150$nm et $d = 2.5\mu$m)

Je vais dans cette partie décrire les caractérisations angulaires faites sur les réseaux de sillons d'air dans une couche d'or fabriqués dans la partie précédente. Le schéma et les photos MEB de l'échantillon que je caractérise dans cette partie sont rappelés dans la figure 3.10. Les sillons font 2μm de profondeur et 150nm de large dans une période de 2.5μm.

3.3.1 Description du montage

La caractérisation optique de la structure se fait sur un banc développé au LPN[7]. Il permet de mesurer la réflectivité en lumière polarisée et avec une incidence variable, en utilisant un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) avec un détecteur HgCdTe (MCT) externe refroidi à l'azote liquide. On peut ainsi caractériser l'échantillon pour les longueurs d'ondes de l'infrarouge de 1 à 14 μm (le visible est également accessible). Il est bien entendu possible d'utiliser d'autres sources, séparatrices et détecteurs pour explorer d'autres gammes de longueurs d'onde. Le schéma du banc de caractérisation est présenté sur la figure 3.11, on peut distinguer trois parties.

(A) La source FTIR, qui va fixer la bande spectrale d'étude.

(B) Le système de focalisation achromatique, basé sur un miroir parabolique et un miroir elliptique, qui va permettre d'obtenir un faisceau d'un diamètre d'environ 1.5mm sur l'échantillon, et si besoin de polariser la lumière.

(C) Le système de détection constitué de deux plateaux actionnés par des platines de rotation qui permettent de fixer l'angle du porte-échantillon et du détecteur.

Ce banc permet également de faire des caractérisations en transmission, mais l'échantillon fabriqué étant constitué d'une épaisseur de plusieurs microns d'or alors que l'épaisseur de peau est de l'ordre de 25nm, la lumière incidente est soit réfléchie, soit absorbée. Nous allons voir dans la suite les mesures en réflectivité pour des angles d'incidence de 5° à 50° en polarisation transverse magnétique (TM).

[7] BILLAUDEAU et al., « Angle-resolved transmission measurements through anisotropic two-dimensional plasmonic crystals ».

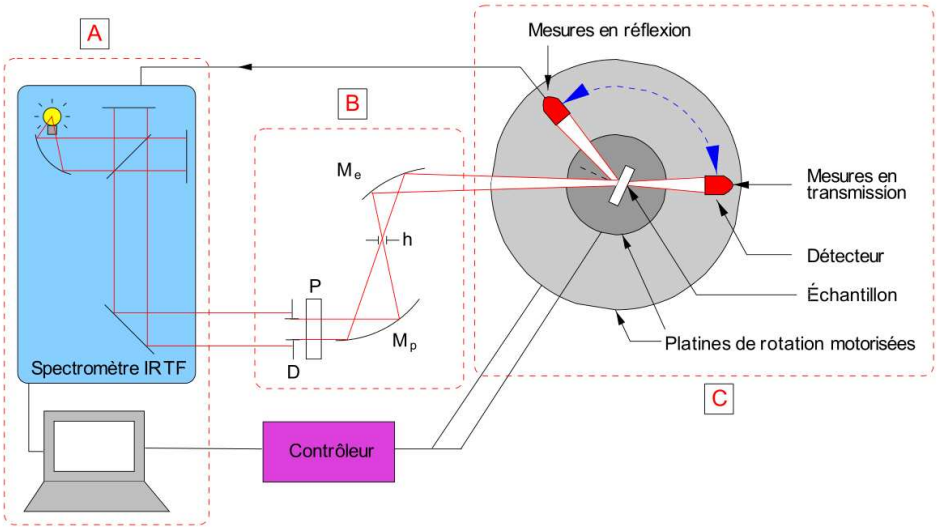

FIGURE 3.11 – Banc de caractérisation optique de l'intensité transmise et réfléchie. La mesure est résolue angulairement. Le banc est composé de trois parties : (A) le spectromètre FTIR, (B) système optique de focalisation et (C) platines de rotation, porte-échantillon, et détecteurs. Ce sont les platines de rotation qui permettent de choisir l'angle d'étude, et de positionner le détecteur en mesure de transmission ou de réflexion. D : diaphragme, P : polariseur, M_e et M_p : miroirs de renvoi, h : trou micrométrique.

3.3.2 Caractérisation optique et simulations

La mesure de la réflectivité entre 3 et 14 μm est tracée en figure 3.12. Le réseau présente deux résonances dans les bandes II et III de transmission de l'atmosphère dans l'infrarouge, à $\lambda = 3.8\mu$m et $\lambda = 10.05\mu$m. Pour chacune de ces résonances, l'absorption est quasi-totale, confirmant les prévisions théoriques qui montraient qu'en structurant une surface d'or sur 7% de sa surface (93% restant un miroir parfait), on pouvait obtenir une réflexion nulle.

On va chercher maintenant à vérifier que la réponse du réseau est bien celle prévue par la théorie en fonction des paramètres géométriques du réseau mesurés au MEB. Les résultats théoriques montrent que pour un réseau de sillons rectangulaires, les résonances du Fabry-Perot sont au premier ordre dans un rapport trois à $\lambda/4$ et $3\lambda/4$ (courbe verte en traits pointillés sur la figure 3.12). Il n'est pas possible d'obtenir une courbe théorique correspondant aux résultats expérimentaux en faisant uniquement varier les paramètres géométriques w et h du sillon.

Cette différence entre résultats expérimentaux et théoriques peut s'expliquer par la combinaison de deux effets qui correspondent chacun à une augmentation de l'indice effectif au fond de la fente. D'une part, les observations au MEB montrent les sillons deviennent plus fins vers le fond. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, l'indice effectif augmente lorsqu'on réduit la largeur du sillon. Par ailleurs, ce rétrécissement du fond des sillons peut rendre plus difficile le retrait de GaAs, augmentant également l'indice effectif. Si on suppose

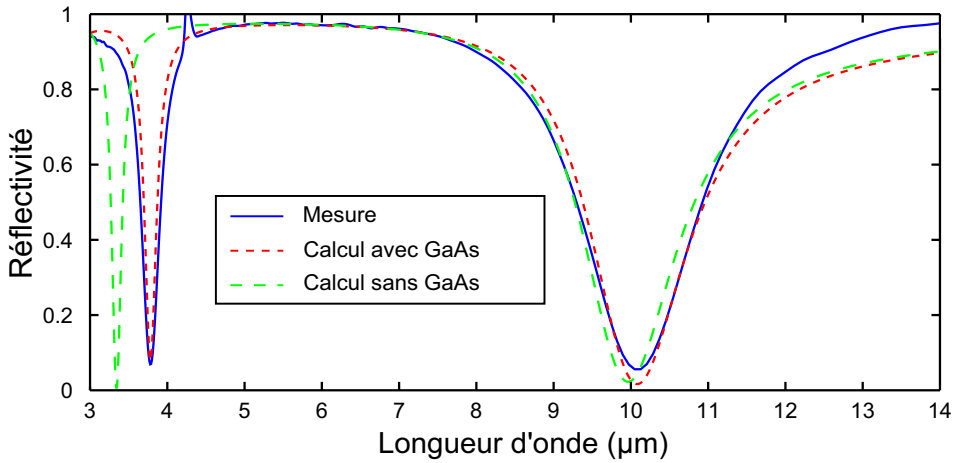

FIGURE 3.12 – Réflectivité de l'onde plane polarisée TM incidente sur la surface métallique avec un angle de 5° mesurée (ligne bleue pleine) et calculée pour un réseau de sillons rectangulaires métalliques ($w = 150$nm, $h = 2\mu$m et $d = 2.5\mu$m) avec 200nm de GaAs au fond de chaque sillon (ligne rouge pointillée) et sans GaAs (ligne verte pointillée). On observe deux résonances correspondant aux ordres 1 et 3 du résonateur Fabry-Perot dans la cavité.

qu'il reste 200nm de GaAs au fond du sillon qui n'ont pas été retirés lors du passage dans la solution acide/oxydant, on peut accorder les positions théoriques des pics et leur amplitude avec la mesure comme indiquée par la courbe rouge pointillée.

Il y a bien entendu d'autres configurations combinant ces deux hypothèses qui permettent de retrouver les résultats expérimentaux.

Dans la figure 3.13, le diagramme de réflectivité mesuré est tracé pour des angles allant de 5° à 40°. Il apparaît clairement sur ce graphe que les deux résonances sont indépendantes de l'angle d'incidence, ce qui est conforme au fait que les résonances sont localisées dans les sillons comme le montre les cartes de champ électromagnétique. En insert de la figure, sont comparées les valeurs mesurées et théoriques de l'absorption à la résonance à $\lambda = 10.05\mu$m. Cette absorption reste élevée même pour les grands angles.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit les principales caractéristiques des résonateurs verticaux, ainsi que la manière de les fabriquer et vérifier que la caractérisation expérimentale était cohérente avec les prévisions théoriques. Nous avons fabriqué un réseau de sillons à grand rapport d'aspect qui présentent plusieurs pics d'absorption quasi-total en polarisation TM correspondant aux différents ordres de résonance du résonateur équivalent type Fabry-Perot. Ces résonances localisées ne dépendent pas de l'angle d'incidence dans le plan perpendiculaire au sillons (absorption supérieure à 80 % jusqu'à 60°) et l'absorption est localisée dans le sillon le long des parois métalliques. Nous verrons dans le chapitre 4 comment l'énergie

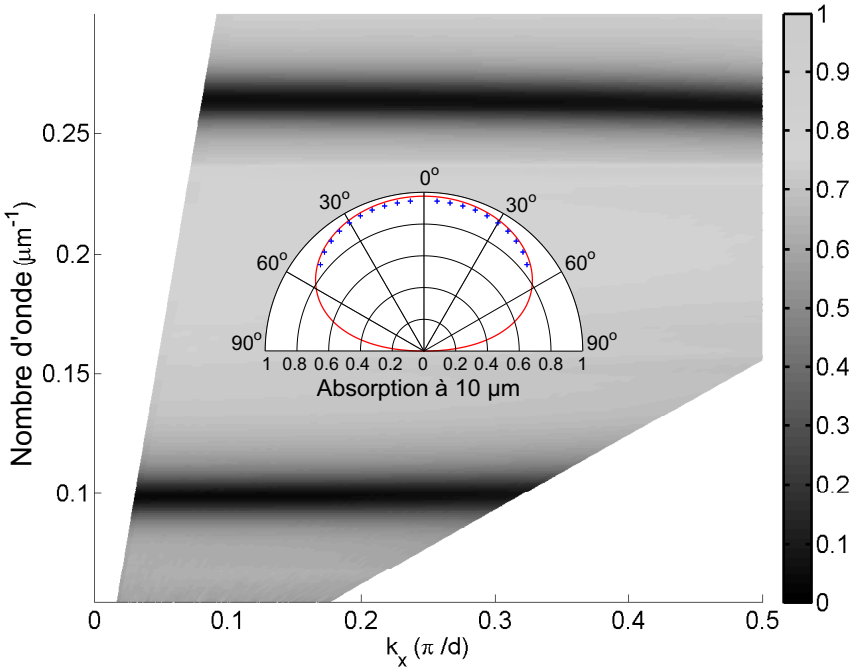

FIGURE 3.13 – Diagramme de réflectivité mesurée pour des angles d'incidence de 5° à 50°. En abscisse de ce diagramme se trouve le vecteur d'onde dans le plan $k_x = \frac{2\pi \sin(\theta)}{\lambda}$ et en ordonnée le nombre d'onde exprimée en μm^{-1}. Les deux résonances à $\lambda = 10.05\mu$m et $\lambda = 3.8\mu$m sont bien indépendantes de l'angle d'incidence. Dans l'insert, les valeurs mesurées (points bleus) et théoriques (ligne rouge) de l'absorption à la résonance sont tracées en fonction de l'angle d'incidence.

incidente peut être concentré dans un sillon de largeur très sub-longueur d'onde ($w < \lambda/70$). On peut passer à des structures non-polarisantes (et donc absorbant omnidirectionnel) en fabriquant des réseaux de sillons entrecroisés. Cette structure est intéressante pour la détection infrarouge, on peut en effet imaginer placer un matériau absorbant dans les sillons et optimiser la structure pour que la concentration se fasse essentiellement dans ce matériau.

Les mêmes phénomènes d'absorption ont également été observés sur des structures horizontales[8], et il a été montré qu'on pouvait utiliser à la place du matériau isolant un matériau absorbant photo-sensible[9]. Le principal avantage de la structure horizontale est sa facilité de fabrication, nécessitant un simple lift-off, qui a déjà permis plusieurs études expérimentales. L'autre avantage considérable de cette structure est la faible quantité de matériau nécessaire pour obtenir une absorption totale. Dans le cas où l'empilement métal/isolant/métal est vertical, il n'y a ni facilité de fabrication, ni besoin d'une faible quantité de matériau. Par contre, le taux d'occupation est très faible, et il va donc être possible de fabriquer des struc-

[8] HAO et al., « High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial » ; HAO et al., « Nearly total absorption of light and heat generation by plasmonic metamaterials » ; LE PERCHEC et al., « Plasmon-based photosensors comprising a very thin semiconducting region » ; LÉVÊQUE et al., « Tunable composite nanoparticle for plasmonics ».

[9] LE PERCHEC et al., « Plasmon-based photosensors comprising a very thin semiconducting region ».

tures bien plus complexes en juxtaposant un grand nombre de sillons. Ce type de structures ouvre des perspectives intéressantes pour l'ingénierie du champ électromagnétique dans des volumes très sub-longueur d'onde, et nous verrons dans le chapitre 6 qu'on peut obtenir d'autres dispositifs à partir de cette structure de base.

Chapitre 4 Mécanisme de focalisation de l'énergie dans des ouvertures sub-longueur d'onde

Sommaire

4.1 Analyse énergétique **48**
4.1.1 Flux de Poynting 48
4.1.2 Décomposition du flux 50
4.2 Analyse d'une interface isolée **53**
4.2.1 Formalisme de l'interface isolée 53
4.2.2 Étude d'un système résonant 54
4.2.3 Étude d'un système hors résonance 54
4.3 Conclusion **55**

Les structures décrites au chapitre 3 présentent une résonance localisée, donc indépendante de l'angle d'incidence. A la résonance, nous avons montré que l'absorption est totale, même s'il n'y a qu'une faible portion de la surface qui est structurée par des sillons (95% du reste de la surface est un miroir parfait) et que cette absorption est localisée dans les parois métalliques des sillons grâce à une résonance de type Fabry-Perot. Ceci est une preuve implicite d'un mécanisme de "funneling" (effet d'entonnoir) qui collecte la totalité du flux incident et le concentre vers les ouvertures très sub-longueur d'onde des sillons. Ce mécanisme reste pour une grande part à élucider. Différents modèles ont été proposés : le plus intuitif, basé sur l'allure des lignes d'énergie, est que le funneling est guidé par les plasmons de surfaces propagatifs[1]. Mais nous allons montrer que ceux-ci ne jouent en fait qu'un rôle très secondaire. Un autre modèle exploite la présence d'ondes cylindriques en surface du réseau qui sont supposées rediriger le flux vers l'entrée des sillons[2].

Dans ce chapitre, nous utilisons une analyse énergétique pour élucider le mécanisme responsable de cet effet d'entonnoir. Nous concentrons en premier lieu notre étude sur le cas modèle du réseau de sillons à la résonance. Ce mécanisme est ensuite généralisé à toute combinaison d'ouvertures dans une surface métallique sans avoir nécessairement absorption totale.

[1] Stavrinou et al., « The propagation of electromagnetic power through subwavelength slits in a metallic grating ».
[2] Liu et al., « Microscopic theory of the extraordinary optical transmission » ; Yang et al., « Cross conversion between surface plasmon polaritons and quasicylindrical waves ».

4.1 Analyse énergétique

4.1.1 Flux de Poynting

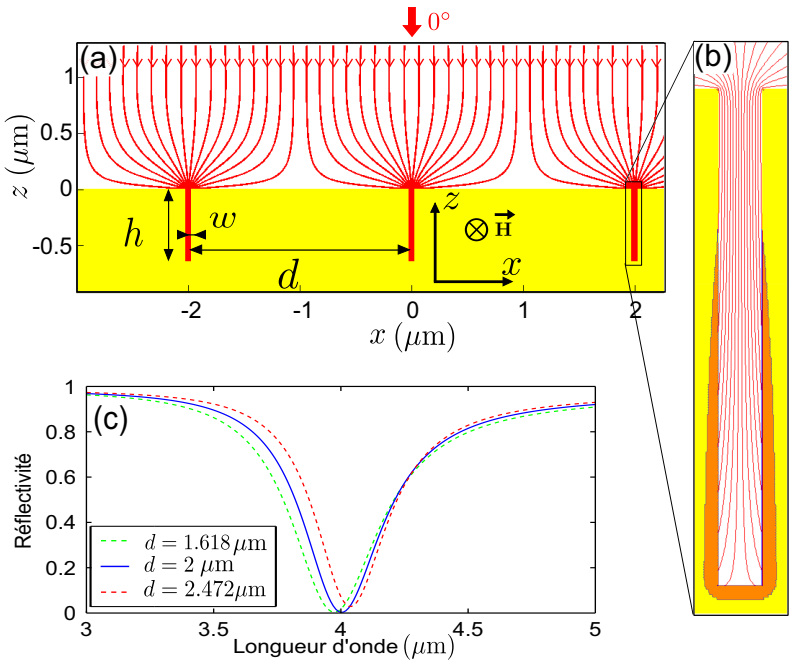

FIGURE 4.1 – (a) Les lignes de flux de Poynting sont tracées sur un réseau de sillons de hauteur $h = 640\,\text{nm}$, de largeur $w = 56\,\text{nm}$ et de période $d = 2\,\mu\text{m}$. Les lignes de flux se courbent pour converger vers l'entrée des sillons. (b) Dissipation de l'énergie dans la partie métallique de la structure. La dissipation se fait principalement le long des parois métalliques des sillons. (c) Spectre de réflectivité pour différentes valeurs de la période du réseau $d = 1.618\,\mu\text{m}$, $d = 2\,\mu\text{m}$ et $d = 2.472\,\mu\text{m}$. La géométrie du sillon reste la même. La période du réseau n'a presque pas d'influence sur la longueur d'onde de résonance, celle-ci étant liée au résonateur type Fabry-Perot dans le sillon.

Nous commençons l'étude sur un réseau de sillons du même type que celui fabriqué dans le chapitre 3. Le schéma de la structure est rappelé en figure 4.1a : les sillons sont de hauteur $h = 640\,\text{nm}$, de largeur $w = 56\,\text{nm}$ et de période $d = 2\,\mu\text{m}$ choisie pour qu'il n'y ait pas d'ordre diffracté quel que soit l'angle d'incidence θ. Cette structure a été optimisée pour avoir une absorption totale à $\lambda = 4\mu\text{m}$ comme indiqué sur le spectre de la figure 4.1 c (courbe bleue trait plein). Les spectres de réflectivité sont également montrés lorsqu'on fait varier la période en gardant les mêmes paramètres géométriques de sillon. Lorsqu'on prend une valeur inférieure ($d = 1.618\mu\text{m}$), la résonance est légèrement décalée vers les basses longueurs d'onde alors qu'elle est décalée vers les hautes longueurs d'ondes pour une période plus élevée ($d = 2.472\mu\text{m}$). En fait, le pic d'absorption est du à une résonance de Fabry-Perot dans le sillon qui dépend principalement de la hauteur et de la largeur du sillon. La période a peu d'influence sur la position de la résonance (pour une étude plus approfondie de l'influence des paramètres géométriques de la structure sur la résonance, voir chapitre 2)

Si l'absorption totale est bien expliquée par une résonance localisée de type Fabry-Perot dans les sillons, la manière dont toute l'énergie incidente peut être redirigée vers les ouvertures des sillons très sub-longueurs d'onde reste difficile à appréhender. Une première piste de compréhension est donnée par une analyse énergétique. Dans la figure 4.1a-b, les lignes de flux de Poynting sont tracées au-dessus de la structure et dans le sillon à la longueur d'onde de résonance, en incidence normale et en polarisation TM. Le principe du tracé est que le flux entre deux lignes est identique, la direction du flux étant indiquée par les flèches sur les lignes. Ainsi, lorsqu'on considère le flux d'énergie loin de la structure, les lignes sont équidistantes, correspondant à la propagation d'une onde plane dans le vide. Le rapprochement des lignes de flux de Poynting traduit une concentration de l'énergie. La figure 4.1a : montre que lorsqu'on se rapproche de la structure, les lignes se courbent et convergent vers l'ouverture du sillon. L'énergie incidente sur chaque période d est redirigée et est focalisée dans le sillon. Ce phénomène semble correspondre à un procédé impliquant les plasmons de surface qui, proches de la surface, vont concentrer l'énergie vers les sillons[3].

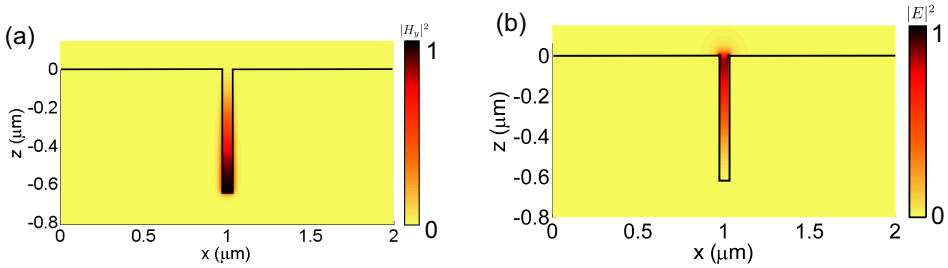

FIGURE 4.2 – (a) Champ magnétique H_y et (b) électrique E dans le sillon de largeur $w = 56$nm, profondeur $h = 640nm$ et période $d = 2\mu$m au pic de la résonance $\lambda_p = 4\mu$m en incidence normale.

La figure 4.1b montre la carte de la dissipation dans le métal, calculée en pratique comme la partie imaginaire de $\varepsilon|E|^2$, (où $\varepsilon(\lambda) = 1 - [(\lambda_p/\lambda + i\gamma)\,\lambda_p/\lambda]^{-1}$ avec $\lambda_p = 161\,\text{nm}$, $\gamma = 0.0085$). et la partie en orange représente la zone où plus de 99.9% de l'énergie est dissipée avec une frontière de puissance volumique constante. On voit que la dissipation se fait le long des parois métalliques du sillon avec un maximum au fond du sillon. Les cartes de champs magnétique H_y et électrique $|E|$ sont tracées sur la figure 4.2. On voit que le maximum de dissipation de l'énergie correspond au maximum du champ magnétique dans le sillon.

Cette redirection du flux vers l'entrée des sillons ressemble étroitement au mécanisme classique d'excitation de SPP et à leur propagation le long de l'interface métallique. Stavrinou *et al.* ont d'ailleurs fait l'hypothèse que le funneling est guidé par les SPP[4].

Pour comprendre le mécanisme responsable de l'effet d'entonnoir, nous proposons de pousser plus loin l'analyse énergétique amorcée dans les travaux de Miyazaki *et al.*[5]. Nous étudierons également le comportement angulaire de cette structure car la résonance est indé-

[3]STAVRINOU et al., « The propagation of electromagnetic power through subwavelength slits in a metallic grating ».
[4]Ibid.
[5]MIYAZAKI et al., « How can a resonant nanogap enhance optical fields by many orders of magnitude? »

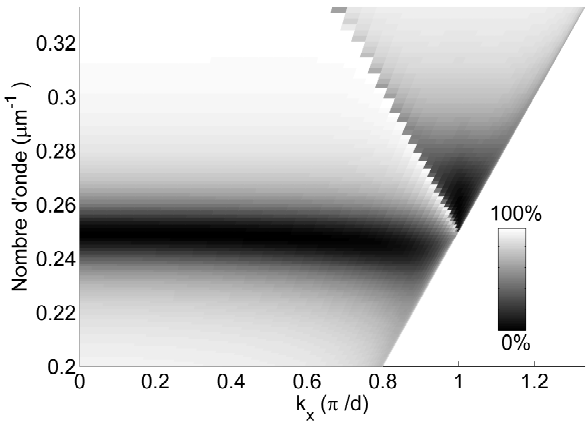

FIGURE 4.3 – Diagramme de réflectivité sur une échelle de gris en fonction du nombre d'onde $\sigma = 1/\lambda$ et du vecteur d'onde dans le plan $k_x = 2\pi/\lambda \sin(\theta)$. La résonance est indépendante de l'angle d'incidence, hormis aux grands angles où l'ordre diffracté vient perturber la résonance (nous reviendrons sur cet effet dans le chapitre 6.)

pendante de l'angle d'incidence, et ce phénomène de funneling existe quelque soit l'incidence (voir le diagramme de réflectivité de la structure sur la figure 4.3).

4.1.2 Décomposition du flux

Pour analyser le mécanisme responsable de cet effet d'entonnoir sur l'énergie, nous séparons en trois termes le champ électromagnétique dans l'air :

$$H_{\text{total}} = H_i + H_r + H_e, \tag{4.1}$$

où H_i est l'onde incidente, H_r est l'onde réfléchie et H_e est la somme des ondes évanescentes diffractées. De la même manière, on aura pour les composantes du champ électrique :

$$E_{\text{total}} = E_i + E_r + E_e. \tag{4.2}$$

Grâce à la décomposition des équations 4.1 et 4.2, on peut exprimer le vecteur de Poynting comme la somme de six termes :

$$S = S_i + S_{ei} + S_r + S_{er} + S_{ir} + S_e, \tag{4.3}$$

où $S_i = E_i \times H_i$,

$S_{ei} = E_e \times H_i + E_i \times H_e$,

$S_r = E_r \times H_r$,

$S_{er} = E_e \times H_r + E_r \times H_e$,

$S_{ir} = E_i \times H_r + E_r \times H_i$ et

$S_e = E_e \times H_e$.

Ici, nous prenons la notation $E \times H$ pour désigner la moyenne temporelle du produit vectorielle, qui est calculée comme $\frac{1}{2}\Re(\mathrm{E} \times \mathrm{H}^*)$. Les termes S_i et S_r sont respectivement les flux incidents et réfléchis, et traduisent la propagation d'une onde plane dans l'air. Le terme S_e correspond à l'énergie transportée par les ondes évanescentes, qui incluent les plasmons de surface. Le terme S_{ei} est l'interférence magnéto-électrique (IME) entre l'onde incidente et le champ évanescent. De même, S_{er} est l'IME entre l'onde réfléchie et le champ évanescent. Enfin, S_{ir} est l'IME entre l'onde incidente et l'onde réfléchie. Les termes de l'équation 4.3 ont chacun une divergence nulle, donc conservent le flux et peuvent être considérés comme des vecteurs d'énergie indépendants dans l'air.

Pour simplifier l'analyse dans un premier temps, nous allons nous placer à la longueur d'onde de résonance du réseau de sillons : $\lambda = 4\mu$m. Il n'y a pas d'ondes réfléchies : les champs H_r et E_r sont nuls, et on peut exprimer le vecteur de Poynting comme : $S = S_i + S_{ei} + S_e$.

Dans la figure 4.4, sont tracées les lignes de flux des termes S_i, S_e, S_{ei} et S pour trois angles d'incidences $\theta = 0\,°$, $\theta = 30\,°$ et $\theta = 50\,°$. Toutes les figures sont présentées avec un flux constant entre deux lignes et le même nombre de lignes par période. Comme attendu, les lignes de flux de S_i sont équidistantes et se propagent vers la surface, correspondant au flux d'une onde plane propagative dans l'air.

Les lignes de flux de S_e sont inexistantes en incidence normale (le flux est 1000 fois plus faible que pour les autres termes), les plasmons ne jouent donc aucun rôle dans la focalisation à $0\,°$. Pour les incidences plus élevées, les lignes de S_e partent d'un côté du sillon vers l'autre. Le terme S_e joue donc un rôle de redistribution de l'énergie incidente sur la surface du réseau. Mais il n'a par contre aucune influence sur la concentration de l'énergie vers l'ouverture du sillon.

Les lignes de flux de S_{ei} partent de la surface du réseau, puis se courbent et convergent vers l'ouverture du sillon. En incidence normale, sur la surface métallique, elles compensent les flux de l'onde incidente et renvoient l'énergie vers le sillon. Aux incidences de $\theta = 30\,°$ et $\theta = 50\,°$, les lignes de flux de S_{ei} ne compensent plus exactement le flux incident. Le flux partant de la surface est plus important que le flux incident à gauche du sillon, alors que c'est l'inverse à droite du sillon, ce phénomène s'amplifiant avec l'augmentation de l'angle d'incidence. Cependant, cette asymétrie de S_{ei} est en réalité compensée par la redistribution liée au terme S_e.

Par ailleurs, d'autres travaux ont montré que les ondes quasi-cylindriques prédominent dans le mécanisme de propagation le long de l'interface métal/diélectrique[6]. Dans notre cas, si on trace les lignes perpendiculaires aux lignes de flux de S_{ei}, sachant que $E_e \times H_i$

[6] Liu et al., « Microscopic theory of the extraordinary optical transmission » ; Yang et al., « Cross conversion between surface plasmon polaritons and quasicylindrical waves ».

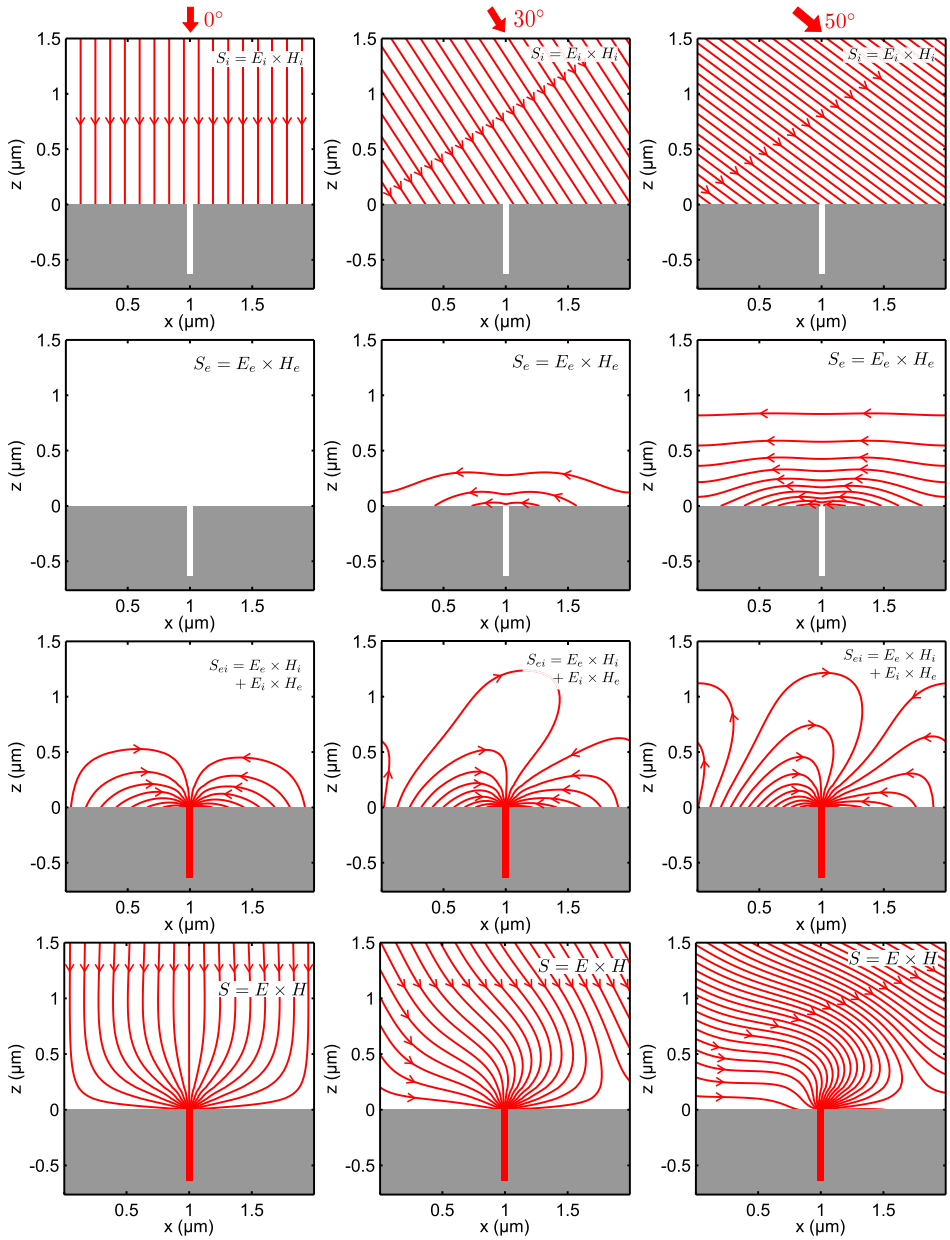

FIGURE 4.4 – Lignes de flux de Poynting sur une période du réseau de sillons pour trois angles d'incidence $\theta = 0\,°$ (colonne de gauche), $\theta = 30\,°$ (colonne du milieu) et $\theta = 50\,°$ (colonne de droite) tracées à $\lambda = 4000\,\text{nm}$. Les lignes de flux de l'onde incidente sont tracées en (a), (b) et (c). Les lignes de flux du champ évanescent sont tracées en (d), (e) et (f). Les lignes de flux de l'interférence entre l'onde incidente et le champ évanescent sont tracées en (g), (h) et (i). Les lignes de flux du vecteur de Poynting sont tracées en (j), (k) et (l).

est le terme prédominant, on retrouve que la forme du champ électrique évanescent est quasi-cylindrique.

En conclusion, nous venons de montrer que c'est l'interférence du champ évanescent avec

l'onde incidente qui est responsable de ce phénomène d'entonnoir qui concentre l'énergie incidente vers l'ouverture du sillon. Le champ évanescent joue un rôle de redistribution de l'énergie sur la période du réseau, mais n'a pas d'influence directe sur le phénomène de concentration de l'énergie. Grâce à un formalisme de l'interface isolée, nous allons généraliser dans la suite ce résultat à d'autres types de structures.

4.2 Analyse d'une interface isolée

4.2.1 Formalisme de l'interface isolée

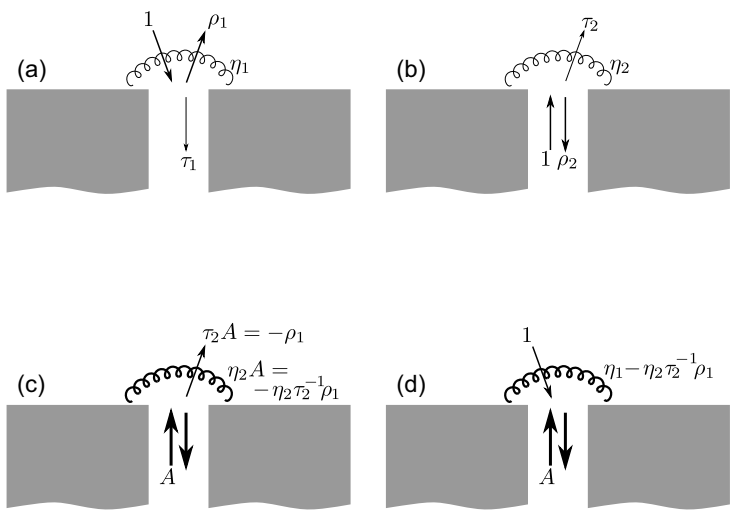

FIGURE 4.5 – Analyse de l'interface unique isolée d'un réseau métallique optimisé pour absorber toute la lumière incidente (a) Onde plane unitaire venant de l'air : ρ_1 et τ_1 sont les amplitudes des ondes réfléchie et transmise respectivement, et η_1 est le vecteur d'amplitude du champ évanescent. (b) Mode d'amplitude unitaire arrivant du bas de la fente : ρ_2 et τ_2 sont les amplitudes des ondes réfléchie dans la fente et transmise dans l'air respectivement. (c) Même configuration que (b), mais le mode propagatif a une amplitude A. (d) Superposition de (a) et (c), lorsque A correspond à l'amplitude du mode résonant dans le cas du réseau de sillon. La réflectivité est nulle et le champ évanescent est principalement généré par l'onde résonant dans le sillon.

Nous allons analyser l'interface isolée du réseau de sillons précédent à la résonance[7]. Cela revient à considérer un réseau de fentes infinies. Nous considérons cette interface isolée dans plusieurs situations différentes. Dans le premier cas (Fig. 4.5(a)), le champ incident est une

[7] LALANNE et al., « Perturbative approach for surface plasmon effects on flat interfaces periodically corrugated by subwavelength apertures ».

onde plane d'amplitude unité venant de l'air, l'onde réfléchie dans l'air a l'amplitude ρ_1 et le champ évanescent a un vecteur d'amplitude η_1. Comme le rapport d'ouverture est très faible, on a $|\rho_1| \lesssim 1$ et $|\eta_1| \ll 1$. Dans le cas de la figure 4.5(b), l'onde incidente vient du bas des fentes et a une amplitude unitaire. L'onde transmise vers l'air a une amplitude $\tau_2 \ll 1$ et l'amplitude du champ évanescent généré vaut η_2. Les calculs montrent que les champs évanescents η_1 et η_2 sont quasiment égaux.

4.2.2 Étude d'un système résonant

Lorsqu'on se place à la résonance (Fig. 4.5(c)), le mode propagatif venant du bas du sillon a une amplitude A telle que $\tau_2 A = -\rho_1$ et donc d'amplitude réfléchie nulle, toutes les amplitudes de la Fig. 4.5(b) sont multipliées par le facteur $A = -\rho_1 \tau_2^{-1}$. La superposition des cas décrits dans les figures 4.5(a) et 4.5(c) décrit le réseau à la résonance (voir figure 4.5(d)). Par ailleurs, le champ évanescent $\eta_1 + \eta_2 A \simeq \eta_2 A$, car $|\eta_1| \simeq |\eta_2|$ et $A \gg 1$. Dans le cas de la géométrie décrite dans la partie 5.1, à la résonance, le calcul donne $A \simeq 11$.

En bref, l'onde qui va résonner dans les sillons s'en échappe comme la somme d'une onde propagative et d'un champ évanescent. L'onde plane propagative transmise depuis le sillon vers l'air va interférer destructivement avec l'onde réfléchie depuis l'air vers l'air, amenant à une réflexion nulle. Le champ évanescent généré va interférer avec l'onde incidente pour diriger l'énergie vers l'ouverture du sillon, où elle sera dissipée le long des parois métalliques. Cette analyse n'est plus nécessairement limitée au cas des sillons, puisque l'ouverture peut déboucher sur tout autre type de structures résonantes. On peut par exemple l'appliquer aux cas de sphères[8].

4.2.3 Étude d'un système hors résonance

On se place maintenant hors de toute résonance, dans le cas décrit dans la figure 4.5(a), en considérant le cas où les fentes sont infinies, mais toujours avec la géométrie considérée dans la partie 5.1 ($w = 56$nm et $d = 2\mu$m. Pour un angle d'incidence de 30°, on a $|\rho_1|^2 = 0.83$, donc 17% de l'énergie incidente rentre dans les fentes. Cette valeur est bien plus grande que ce que laisserait attendre le rapport d'ouverture $w/d = 2.8\%$. Il semble donc qu'il y ait un effet d'entonnoir, même hors résonance. Si on compare la situation par rapport au cas de la résonance de la figure 4.5(d), le champ évanescent généré est divisé par un facteur $|A| \simeq 11$. L'interférence de l'onde incidente avec le champ évanescent est donc responsable de la concentration de $1/|A| \simeq 9\%$. Les 8% manquants viennent de l'interférence du champ évanescent avec l'onde réfléchie, qui contribue paradoxalement également à l'effet d'entonnoir de l'énergie. En fait, dans le terme $S_{er} = E_e \times H_r + E_r \times H_e$, $E_e \times H_r$ est le terme dominant. Or, le champ magnétique H_r ne change pas de signe lors de la réflexion, ce qui signifie que S_{er} s'ajoute à S_{ei} avec une amplitude $S_{er} = |\rho_1| S_{ei}$ (comme S_{ei} vaut 9% et $|\rho_1| = 0.9$, on trouve bien que $S_{er} \simeq 8\%$).

[8] Teperik et al., « Omnidirectional absorption in nanostructured metal surfaces ».

4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en lumière le mécanisme responsable de l'effet d'entonnoir dans notre structure modèle de réseau de sillons. Les plasmons ne jouent qu'un rôle de redistribution de l'énergie dans ce mécanisme, et c'est l'interférence entre l'onde incidente et le champ évanescent qui est responsable de la concentration de l'énergie dans le sillon. Cette énergie en résonance dans le sillon est dissipée par les pertes du métal sur les parois du sillon. Nous avons ensuite généralisé, grâce au formalisme de l'interface isolée, ces résultats à toute combinaison d'ouvertures sub-longueur d'onde dans une surface métallique.

Ces résultats ouvrent une nouvelle piste pour la conception d'antennes résonnantes électromagnétiques basées sur une ingénierie du champ évanescent. Il faut optimiser la combinaison d'ouvertures de l'interface pour que le champ évanescent généré ramène dans son interférence avec le champ incident le plus d'énergie vers les ouvertures.

Chapitre 5 Métamatériau à grand indice de réfraction

Sommaire

5.1 Equivalence entre un réseau métallique et un métamatériau . . 57

5.1.1 Formalisme de Shen, Catrysse et Fan 57

5.1.2 Application au réseau de sillons en or 59

5.2 Etude en incidence angulaire 60

5.2.1 Cas de l'incidence dans le plan perpendiculaire aux sillons 61

5.2.2 Mesure expérimentale en incidence dans le plan des sillons 62

5.3 Nouveau formalisme d'équivalence 64

5.4 Conclusion 65

Dans ce chapitre , nous montrons que le réseau de sillons fabriqué et caractérisé précédemment se comporte comme un métamatériau à grand indice ($n \simeq 17$). La première équivalence entre un réseau métallique en transmission et une lame de diélectrique a été introduite en 2005 par Shen *et al.*[1]. Nous allons adapter en premier lieu ce formalisme à un réseau en réflexion unidimensionnel, périodique suivant la direction x, et vérifier que la couche diélectrique équivalente a la même réponse optique que le réseau fabriqué. Par ailleurs, nous introduirons la notion de renormalisation dans la direction y, suivant laquelle le réseau est considéré infini. Des mesures angulaires ont été effectuées suivant cet axe, qui corroborent notre approche. La dépendance angulaire de la résonance suit les lois de Snell-Descartes, qui doivent être réécrites dans le cas du métamatériau, à partir du principe de Fermat.

5.1 Equivalence entre un réseau métallique et un métamatériau

5.1.1 Formalisme de Shen, Catrysse et Fan

Polarisation TM

Dans leur article publié en 2005, Shen, Catrysse et Fan décrivent un formalisme d'équivalence entre un réseau métallique en transmission et une couche diélectrique d'indice indépendant

[1] Shen et al., « Mechanism for designing metallic metamaterials with a high index of refraction ».

de la longueur d'onde et contrôlé par les seuls paramètres géométriques du réseau. Nous étendrons dans cette première partie leur raisonnement aux réseaux de sillons (*i.e.* des fentes non débouchantes) qui fonctionne donc en réflexion. Par ailleurs, dans notre cas, le métal n'est pas parfait et il faut considérer un indice effectif n_{eff} à l'intérieur des sillons.

On considère le comportement des réseaux de fentes ou sillons décrits dans les figures 5.1a et 5.1b dans le régime sub-longueur d'onde ($d < \lambda/2$) où l'onde incidente est polarisée TM. On peut montrer par une approche heuristique que ces réseaux se comportent comme une couche diélectrique d'indice $\bar{n}$ et d'épaisseur $\bar{h}$, qui est soit entourée d'air pour le réseau de fentes, soit posée sur un substrat d'or pour les sillons, comme représenté schématiquement sur les figures 5.1c et 5.1d. Les variables avec une barre dénotent les dimensions caractéristiques de la couche diélectrique équivalente à un réseau métallique.

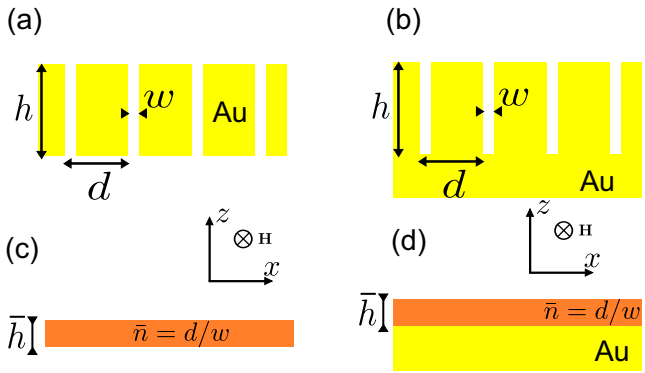

FIGURE 5.1 – (a) Schéma du réseau de fentes métalliques débouchantes et (b) du réseau de sillons non débouchants. Les paramètres géométriques sont w et h la largeur et la hauteur de la fente/sillon et d la période du réseau. (c) Couche de diélectrique équivalente au réseau de fentes débouchantes d'indice $\bar{n} = d/w$ et d'épaisseur $\bar{h}$. (d) Couche de diélectrique sur un substrat d'or équivalent au réseau de sillons métalliques. La couche diélectrique a pour indice $\bar{n} = d/w$ et est d'épaisseur $\bar{h}$.

L'approche heuristique s'appuie sur les concepts de résonance Fabry-Perot, de flux de Poynting instantané et de conservation de l'énergie. En premier lieu, la fente (resp. sillon) se comporte comme un résonateur Fabry-Perot, dont les fréquences de résonance sont approximativement données par $k_0 \times h \simeq m\pi$ où k_0 est le vecteur d'onde de la lumière incidente et m est un entier positif pour les fentes (resp. un entier positif impair dans le cas des sillons, à cause du déphasage de π lors de la réflexion sur le métal au fond du sillon). Cette condition peut être réécrite $(\bar{n}k_0) \times (h/\bar{n}) \simeq m\pi$, ce qui équivaut à dire qu'une couche diélectrique d'indice $\bar{n}$ et d'épaisseur $\bar{h} = h/\bar{n}$ donnera les mêmes résonances. Pour déterminer de manière unique la valeur de $\bar{n}$, on écrit que le flux d'énergie instantané à travers la surface du réseau doit être le même pour les deux systèmes :

$$(\bar{E} \times \bar{H})_z \times d = (E \times H)_z \times w. \tag{5.1}$$

On impose également que l'énergie stockée dans la couche du réseau soit la même pour les

deux systèmes à tout instant t :

$$\frac{1}{2}(\bar{\epsilon}\bar{E}^2 + \bar{\mu}\bar{H}^2) \times \bar{h} \times d = \frac{1}{2}(\epsilon E^2 + \mu H^2) \times h \times w. \tag{5.2}$$

Par ailleurs, rappelons que les équations de Maxwell donnent pour les ondes planes les relations $\bar{Z} = \bar{E}/\bar{H} = \sqrt{\bar{\mu}/\bar{\epsilon}}$ et $Z = E/H = \sqrt{\mu/\epsilon}$. Nous prenons aussi $\bar{\mu} = \mu = 1$, *i.e.* le réseau et la couche équivalente sont non magnétiques.

On peut alors réécrire le couple d'équations 5.1, 5.2 en éliminant les variables H et $\bar{H}$:

$$\bar{E}^2\sqrt{\bar{\epsilon}}d = E^2\sqrt{\epsilon}w, \tag{5.3}$$

$$\bar{\epsilon}\bar{E}^2\bar{h}d = \epsilon E^2 hw. \tag{5.4}$$

En injectant l'équation 5.3 dans l'équation 5.4, on a la relation :

$$\bar{h}\sqrt{\bar{\epsilon}} = h\sqrt{\epsilon}. \tag{5.5}$$

Polarisation TE

Pour prendre en compte la polarisation TE (où le réseau se comporte comme un miroir presque parfait, les plasmons de surface n'étant pas excités), il faut noter que les composantes diagonales des tenseurs de permittivité et perméabilité sont différentes, autrement dit le métamatériau équivalent est anisotrope. Ce qui a été écrit en polarisation TM est vrai pour les composantes $\bar{\epsilon_x}$, $\bar{\mu_y}$ et $\bar{\epsilon_z}$. En polarisation TE, les sillons supportent des modes évanescents, on s'appuie sur le formalisme de Pendry *et al.*[2] pour obtenir les expressions des autres composantes de ϵ et μ :

$$\bar{\mu}_x = \frac{8w}{\pi^2 d}\mu_x, \tag{5.6}$$

$$\bar{\epsilon_y}(\lambda) = \frac{\pi^2 d}{8w}(\epsilon_y - \frac{\lambda^2}{4w^2\mu_x}), \tag{5.7}$$

où λ est la longueur d'onde. Notons qu'en polarisation TE, la composante qui joue le rôle le plus important dans la réponse optique du réseau est $\bar{\epsilon_y}$. Comme ϵ_y suit un modèle de Drude, $\bar{\epsilon_y} \ll 0$ dans l'infrarouge, ce qui signifie que la couche de diélectrique se comporte comme un miroir métallique en polarisation TE.

5.1.2 Application au réseau de sillons en or

Dans le chapitre 3, un réseau de sillons de période $d = 2.5\mu$m, de largeur $w = 150$nm et de profondeur $h = 2\mu$m a été fabriqué et caractérisé. Les résonances d'ordre 1 et 3 mènent à une absorption quasi-totale de la lumière, l'énergie étant ensuite dissipée dans les parois du métal. Les résultats expérimentaux étaient cohérents avec les prévisions théoriques, mais

[2] Pendry et al., « Mimicking surface plasmons with structured surfaces ».

pour les expliquer parfaitement, il fallait prendre en compte les défauts de la structure lors de la fabrication.

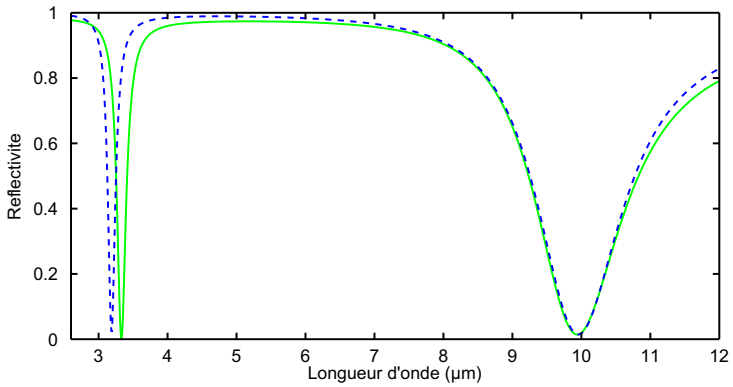

FIGURE 5.2 – Comparaison des spectres de réflectivité du réseau de sillons de période $d = 2.5\mu$m, de largeur $w = 150$nm et de profondeur $h = 2\mu$m et de la couche diélectrique équivalente d'indice $\bar{n} = 16.7$ et d'épaisseur $\bar{h} = 123.5$nm.

On va appliquer le formalisme précédemment décrit à ce réseau de sillons, sans prendre en compte les défauts de fabrications observés. Par ailleurs, pour obtenir la même résonance de type Fabry-Perot dans les deux cas, il faut prendre en compte le déphasage introduit par la réflexion de l'onde propagative remontante dans le sillon à l'interface sillon/air. Ce déphasage dépend de la largeur du sillon w et de la période d. On peut prendre en compte ce déphasage, en ajustant légèrement l'épaisseur du diélectrique équivalent. On retrouve ainsi un bon accord sur la position de l'ordre un, avec les valeurs :

$$\boxed{\begin{array}{c}\bar{n} = 16.7 \\ \bar{h} = 123.5\text{nm}\end{array}}$$

Le spectre calculé pour cette couche de diélectrique est tracé dans la figure 5.2. Le pic de la résonance d'ordre un est en accord parfait avec la résonance observée aussi bien théoriquement qu'expérimentalement dans le réseau de sillons métalliques, par contre la position du pic de la résonance d'ordre trois est légèrement décalée.

5.2 Etude en incidence angulaire

Nous allons dans cette partie vérifier que la couche de diélectrique équivalente au réseau de sillons traduit bien son comportement angulaire. Nous allons pour cela étudier les deux configurations présentées dans la figure 5.3 et qui correspondent au dispositif expérimental. Dans la première configuration, le plan d'incidence est perpendiculaire aux sillons (plan xz) et la lumière est polarisée TM ; Tandis que dans la seconde configuration, le plan d'incidence est parallèle aux sillons (plan yz) et la lumière est polarisée TE. Dans cette seconde configuration, le champ magnétique reste dans le plan parallèle aux sillons et excite donc les

modes TM du réseau de sillons, on observe donc toujours la résonance. Elle se confond avec la première configuration en incidence normale. Les détails de la résolution du problème par la méthode modale B-spline dans cette seconde configuration sont indiquées dans le chapitre 7.

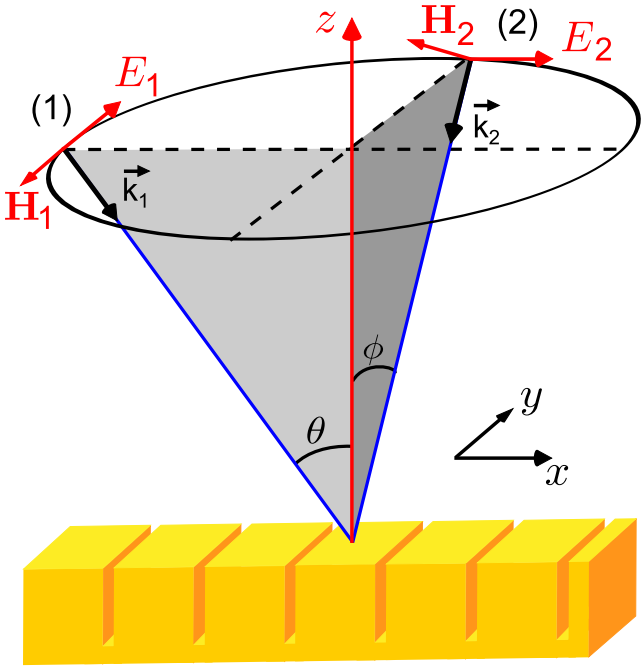

FIGURE 5.3 – Schéma des deux configurations expérimentales de caractérisation du réseau de sillons. Dans le premier cas, classique dont les résultats ont déjà été présentés et étudiés dans le chapitre 3, le plan d'incidence est perpendiculaire aux sillons (plan xz) et la lumière polarisée TM. Dans le second cas, le plan d'incidence est parallèle aux sillons (plan yz) et la lumière polarisée TE.

5.2.1 Cas de l'incidence dans le plan perpendiculaire aux sillons

Nous nous plaçons dans la configuration 1 où l'incidence est dans le plan perpendiculaire aux sillons (plan xz) et la polarisation est TM. Les résultats expérimentaux ont déjà été présentés dans le chapitre 3, et seules les courbes théoriques sont présentées en figure 5.4. Les courbes pleines représentent les spectres de réflectivité calculés par BMM pour trois angles 15° (vert), 30° (rouge) et 50° (bleue) pour le réseau de sillons métalliques. Les spectres de la couche de diélectrique (d'indice $\bar{n} = 16.7$ et épaisseur $\bar{h} = 123.5$nm) sont tracés en pointillés. Le phénomène principal, qui est l'indépendance de la position du pic de résonance par rapport à l'angle d'incidence, est parfaitement traduit par la couche diélectrique. Ce qui s'explique naturellement par le grand indice optique de la couche diélectrique équivalente. L'autre phénomène qui est la diminution de l'absorption lorsque l'angle augmente existe également mais n'est pas aussi fort que celui observé dans le réseau de sillons.

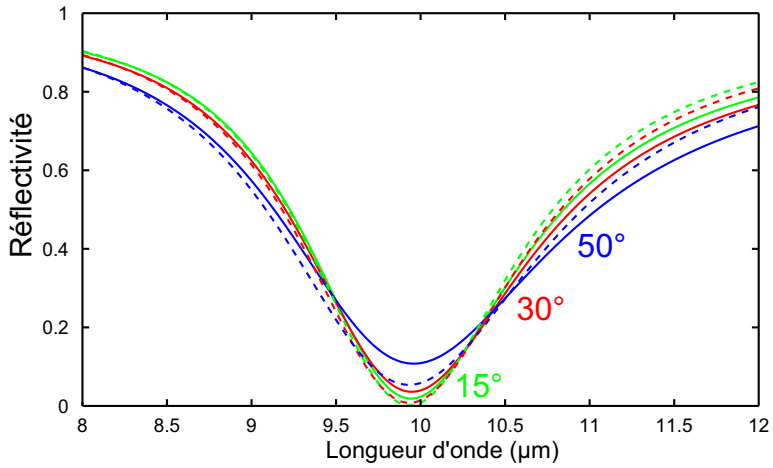

FIGURE 5.4 – Spectres de réflectivité calculés dans la configuration (1) pour trois angles d'incidence 15° (vert), 30° (rouge) et 50° (bleue) dans le cas du réseau de sillons (courbes pleines) et de la couche diélectrique équivalente (courbes pointillées).

5.2.2 Mesure expérimentale en incidence dans le plan des sillons

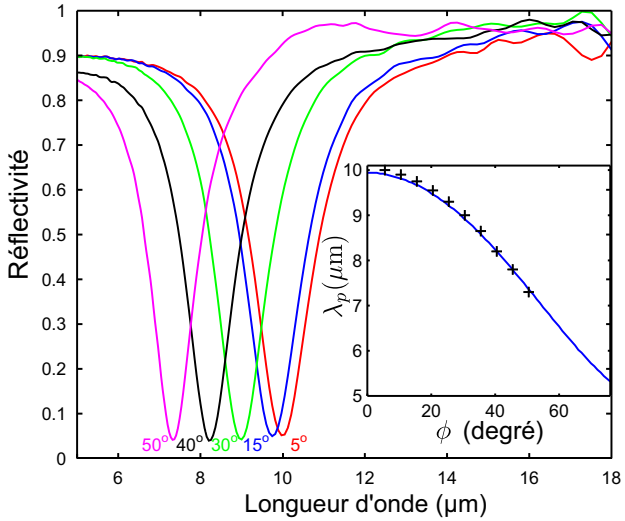

FIGURE 5.5 – Spectres de réflectivité mesurés dans la configuration (2) pour des angles d'incidence variant de 5° à 50°. La résonance est décalée vers les basses longueurs d'onde. L'évolution de la longueur d'onde de résonance λ_p en fonction de l'angle d'incidence est décrite dans l'insert à la fois expérimentalement (points rouges) et théoriquement (courbe bleue).

Le formalisme précédent ne prenait pas en compte la dimension suivant y. Or, on peut montrer aussi bien numériquement qu'expérimentalement que la couche diélectrique précédemment obtenue n'a pas la même réponse optique que le réseau lorsqu'on se met dans le

plan d'incidence yz en polarisation TE. En effet, on observe pour le réseau que le pic de résonance va se décaler vers les basses longueurs d'onde (voir figure 5.5). Nous allons donc étudier comment modifier le formalisme de Shen *et al.* pour décrire ce comportement.

Les spectres mesurés dans la configuration 2, avec une incidence dans le plan des sillons (plan yz) et une polarisation TE, sont tracés dans la figure 5.5. La longueur d'onde de la résonance λ_p dépend fortement de l'angle d'incidence. Il est remarquable de noter que pour les angles d'incidence mesurés de 5° à 50°, l'absorption reste toujours supérieure à 90%.

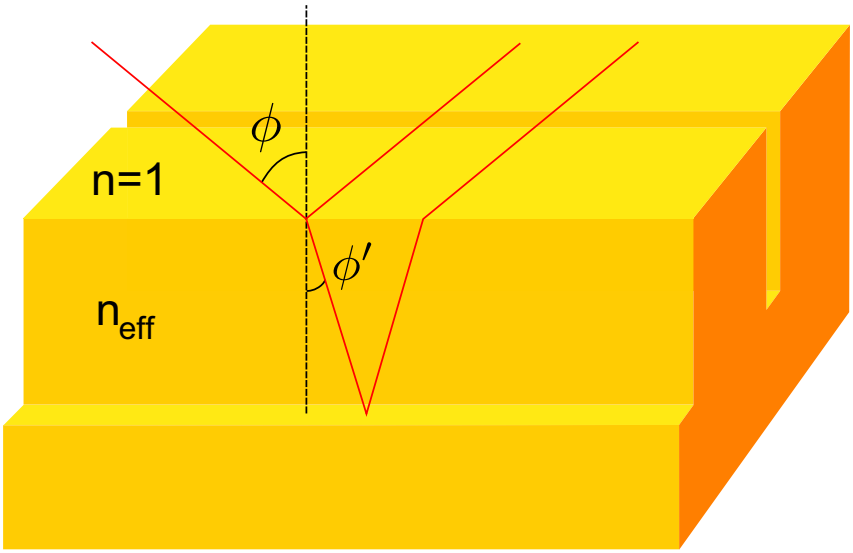

FIGURE 5.6 – Réfraction suivant la loi de Snell-Descartes dans les sillons lorsque l'incidence est dans le plan des sillons.

Pour expliquer ce phénomène de dépendance, il faut se rappeler que les sillons sont infinis dans la direction y. La lumière incidente est focalisée dans les sillons quel que soit l'angle d'incidence comme décrit dans le chapitre précédent (le champ H est dans le plan parallèle aux sillons et excite donc les modes TM). Elle subit ensuite une réfraction dans le sillon qui suit la loi de Snell-Descartes. La figure 5.6 schématise le parcours de l'onde incidente avec une inclinaison ϕ. On peut retrouver analytiquement la dépendance du pic de résonance en fonction de l'angle d'incidence ϕ, en utilisant la loi de Snell-Descartes. Pour cela, il faut prendre en compte le fait que l'indice dans les sillons vu par le mode propagatif est plus élevé que l'indice de l'air du fait du couplage des plasmons sur les parois métalliques. La position λ_p en fonction de l'angle d'incidence ϕ est donnée par la formule :

$$\lambda_p(\phi) = \lambda_p(\phi = 0°)\left(\frac{1}{\cos\phi'} - \frac{\sin\phi\tan\phi'}{n_{\text{eff}}}\right) \tag{5.8}$$

où l'angle ϕ' est donnée par la loi de Snell-Descartes : $\phi' = \arcsin(\frac{\sin\phi}{n_{\text{eff}}})$. Pour un sillon de largeur 150nm gravé dans de l'or, l'indice effectif vaut $n_{eff} = 1.16$. Cette formule permet d'ajuster à la fois les résultats expérimentaux et numériques présentés sur la figure 5.5.

5.3 Nouveau formalisme d'équivalence

Le formalisme de Shen *et al.* ne prend pas en compte la direction y, et ne permet donc pas de rendre compte de la dépendance de la réponse spectrale avec l'incidence. Nous proposons dans la suite une alternative au formalisme de Shen *et al.* pour prendre en compte ce phénomène.

Pour prendre en compte le phénomène dans la direction y, tout en conservant les mêmes propriétés pour la couche diélectrique (même indice et même épaisseur), il faut supposer qu'il y a un changement d'échelle dans la direction y. Ce changement d'échelle est l'inverse de celui ayant lieu dans la direction x, ainsi une longueur L_y dans le réseau de sillons deviendra une longueur $\bar{L_y} = \frac{w}{d} L_y$ dans la couche diélectrique. On peut vérifier que les champs électrique et magnétique effectifs doivent alors valoir $\bar{E} = \sqrt{\frac{w}{d}} E$ et $\bar{H} = \sqrt{\frac{d}{w}} H$.

La loi de réfraction de Snell-Descartes ne peut plus être appliquée telle quelle dans la direction y, les milieux supérieur et inférieur à l'interface n'ayant pas la même échelle. Il faut donc retrouver une loi de Snell-Descartes adaptée à cette situation. Pour cela, on écrit le principe de Fermat, qui prévoit que la lumière se propage d'un point à un autre sur des trajectoires minimisant la durée du parcours, entre un point A dans l'air vers un point B dans la couche réseau (voir la figure 5.7). On définit le point M comme l'intersection entre le

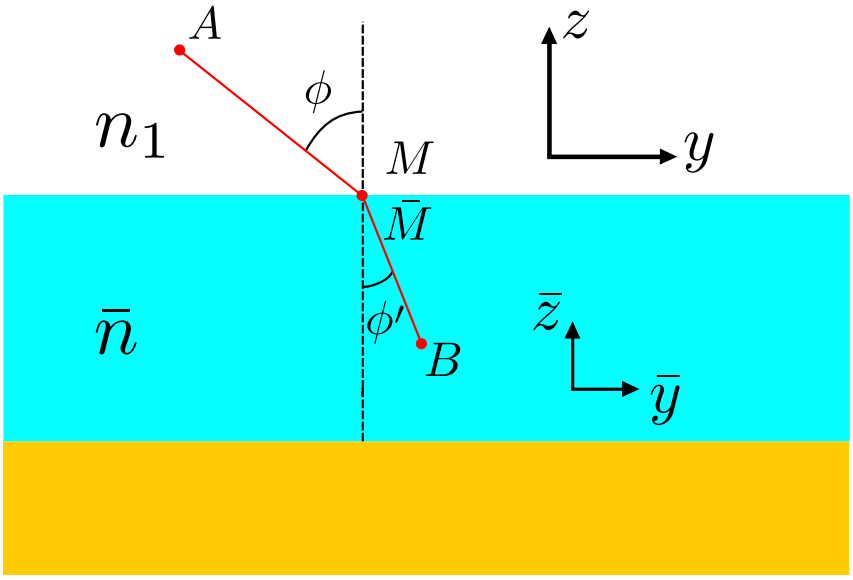

FIGURE 5.7 – Ré-écriture de la loi de Snell-Descartes à partir du principe de Fermat. On minimise le trajet de la lumière entre les points A, dans le milieu supérieur (n_1), et le point B dans la couche diélectrique équivalente d'indice $\bar{n}$. Le point $M = \bar{M}$ est sur le trajet optique à l'interface entre les deux milieux et doit être placé pour minimiser ce trajet.

trajet optique et l'interface entre les deux milieux, sa position doit être telle qu'elle minimise le trajet optique. Ses coordonnées sont (y,z) dans le repère de la région supérieure et ($\bar{y}$,$\bar{z}$) dans le milieu effectif équivalent au réseau métallique. On doit minimiser le chemin optique

$\mathcal{L}(AB)$ parcouru qui vaut :

$$\mathcal{L}(AB) = n_1 AM + \bar{n} MB. \tag{5.9}$$

Pour le minimiser, on écrit que $\mathrm{d}\mathcal{L}(AB) = 0$, sachant que :

$$\mathrm{d}\mathcal{L}(AB) = n_1 \frac{\overrightarrow{AM}}{AM} \cdot \overrightarrow{\mathrm{d}M} + \bar{n} \frac{\overrightarrow{MB}}{MB} \cdot \overrightarrow{\mathrm{d}M} \tag{5.10}$$

On écrit ensuite la relation entre les deux systèmes de coordonnées, *i.e.* entre $\overrightarrow{\mathrm{d}M}$ et $\overrightarrow{\mathrm{d}\bar{M}}$:

$$\overrightarrow{\mathrm{d}M} = \overrightarrow{\mathrm{d}\bar{M}} \frac{L_y}{\bar{L}_y} \tag{5.11}$$

Au final, on a donc :

$$n_1 \sin\phi - \bar{n} \sin\phi' \frac{\bar{L}_y}{L_y} = 0 \tag{5.12}$$

On retrouve ainsi une formule proche de la loi de Snell-Descartes qui prend en compte l'insertion d'un milieu ayant eu transformation des coordonnées en $\bar{y}$ et en $\bar{z}$ dans un espace normal. En injectant cette expression dans le problème de la couche mince, on retrouve la dépendance du pic de résonance en angle de la figure 5.6.

5.4 Conclusion

Le réseau de sillons métalliques dont la fabrication a été décrite dans le chapitre 3 est la première démonstration expérimentale d'un métamatériau ayant un indice effectif proche de 17 et une épaisseur de 125nm. Les caractérisations angulaires de cet échantillon ont permis de compléter le formalisme décrit dans la publication de Shen *et al.* En effet, lorsque l'incidence est dans le plan parallèle aux sillons avec une polarisation TE, la position de la résonance dépend de l'angle d'incidence, tout en conservant une absorption quasi-totale. Cet effet s'explique par une réfraction dans le sillon qui suit la loi de Snell-Descartes. Ainsi, l'onde incidente est focalisée dans le sillon de largeur $\lambda/70$ par un mécanisme d'entonnoir, décrit dans le chapitre 4, avant de subir une réfraction qui suit les lois classiques de l'optique. Pour prendre en compte cet effet dans le métamatériau, il faut redimensionner la structure dans la direction y par un facteur w/d, le taux d'ouverture des fentes par rapport à la période. La loi de Snell-Descartes entre deux milieux d'échelles différentes a été réécrite à partir du principe de Fermat et permet de décrire parfaitement ce phénomène.

Chapitre 6 Couplage dans les résonateurs plasmoniques

Sommaire

6.1 Couplage fort entre les plasmons de surface et le mode de cavité 68

6.1.1 Couplage fort dans des réseaux de sillons 68

6.1.2 Analyse énergétique de la résonance plasmonique à grand facteur de qualité 72

6.2 Couplage entre des résonateurs plasmoniques MIM verticaux . 76

6.2.1 Couplage entre deux résonateurs de même indice effectif 76

6.2.2 Absorbant large bande 80

6.3 Couplage entre des résonateurs MIM plasmoniques horizontaux : application au tri de photons 82

6.3.1 Les structures métal/isolant/métal horizontales 82

6.3.2 Couplage entre les résonateurs MIM 83

6.3.3 Influence de la géométrie du biMIM sur le couplage 85

6.3.4 Fabrication et caractérisation de multi-résonateurs MIM horizontaux 87

6.3.5 Application au tri de photons indépendant de l'angle d'incidence . 90

6.4 Conclusion 92

La résonance d'une cavité Fabry-Perot peut être perturbée par des couplages avec d'autres résonances (résonances plasmons, autre résonance Fabry-Perot,...) Dans une première partie, je vais présenter le couplage fort entre un mode Fabry-Perot de cavité et la résonance plasmon. Ce couplage se traduit par un anti-croisement et l'apparition de nouvelles propriétés pour chacune des résonances. En particulier, elle donne lieu à une résonance ayant un très grand facteur de qualité, qui possède deux avantages supplémentaires pour des applications, l'absorption est totale et une large plage de longueur d'onde peut être balayée en jouant sur l'angle d'incidence. Ces résonances peuvent être appliquées à la détection de gaz ou d'espèces biochimiques. Dans les deux parties suivantes, je m'intéresse aux couplages entre plusieurs résonateurs Fabry-Perot. D'une part dans le cas de réseaux périodiques multi-sillons pour faire de l'absorption large bande, ce qui a un intérêt fondamental aussi bien pour la détection infrarouge que pour le photovoltaïque. D'autre part dans le cas de réseaux de rubans MIM avec pour objectif de faire de l'imagerie hyperspectrale.

6.1 Couplage fort entre les plasmons de surface et le mode de cavité

Dans le cas des réseaux de fentes ou sillons métalliques 1D, on excite classiquement soit des résonances liées aux plasmons de surface, soit des résonances type Fabry-Perot[1]. Des phénomènes de couplage fort entre ces deux types de résonances ont déjà été observés dans la littérature, sur des réseaux de fentes[2] ou de MIM horizontaux[3]. Il a été montré que ce couplage se caractérisait par un anticroisement des deux branches de résonance (absorption ou transmission) dans le plan (ω, k_x) ou équivalent. En prenant le cas de réseaux de MIM verticaux, je vais montrer que les deux états de résonances (plasmonique et Fabry-Perot), lorsqu'on se trouve en couplage fort, mènent à deux nouveaux états hybridés dont les propriétés différent radicalement des états initiaux. En particulier, un des deux états hybridés se caractérise par des résonances à très grands facteurs de qualité qui pourraient être utilisées pour les applications de *sensing* (espèces biochimiques, détection de gaz), où il y a un besoin pour des résonances à grand facteur de qualité[4].

6.1.1 Couplage fort dans des réseaux de sillons

Pour analyser en détail les phénomènes de couplage entre plasmons de surface et modes de cavité de résonateurs MIM type sillons, on reprend la géométrie du réseau de sillons dans de l'or étudié aux chapitres 3 et 4. Le réseau a une période $d = 2.5\mu$m et des fentes de 75nm de large et 600nm de profondeur. La lumière est incidente avec un angle θ et est polarisée TM.

Dans la figure 6.1, on trace les spectres de réflectivité dans l'ordre zéro de la structure pour différents angles d'incidence de 0° à 60°. La résonance Fabry-Perot dans le sillon est à une longueur d'onde de 3.7μm, indépendante de l'angle d'incidence θ s'il est inférieur à 15°. Par ailleurs, la résonance des plasmons de surface est visible à une longueur d'onde $\lambda \simeq d(1 + \sin\theta)$. A partir d'une incidence de 15°, on observe un couplage entre les deux résonances. Le premier effet de ce couplage est l'exaltation de la résonance plasmonique qui impose un quasi-zéro de réflectivité spéculaire entre 30° et 80°. Cette résonance a un très grand facteur de qualité, qui vaut 26 à 30° et 235 à 60°. L'autre effet de ce couplage est le décalage de la position du pic de cavité au delà de 30° qui passe de $\lambda = 3.7\mu$m à $\lambda = 3.5\mu$m. Aux grandes incidences ($\theta = 60°$), le deuxième ordre de la résonance plasmonique apparaît sur le spectre à $\lambda = 2.3\mu$m.

L'étude détaillée du comportement angulaire des résonances est présentée dans la carte de la réflectivité spéculaire sur la figure 6.2a. On observe un phénomène d'anticroisement entre les deux résonances déjà observé dans la littérature sur des structures métal / isolant

[1] Porto et al., « Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits ».
[2] Marquier et al., « Resonant transmission through a metallic film due to coupled modes ».
[3] Jouy et al., « Coupling of a surface plasmon with localized subwavelength microcavity modes ».
[4] Anker et al., « Biosensing with plasmonic nanosensors » ; Kabashin et al., « Plasmonic nanorod metamaterials for biosensing ».

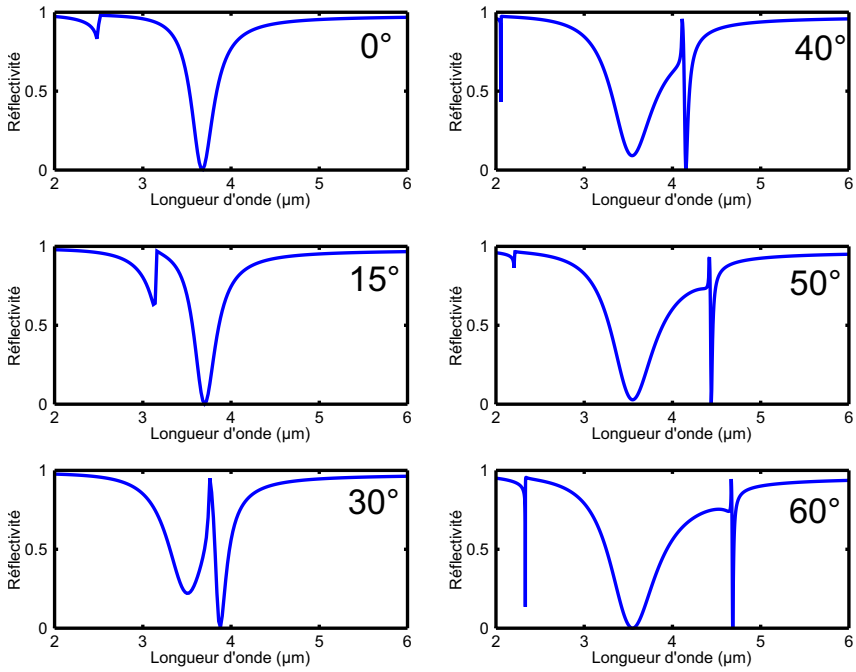

FIGURE 6.1 – Spectres de réflectivité spéculaire d'un réseau de sillons pour différents angles d'incidence de 0° à 60°. La résonance de cavité est à 3.7μm en incidence normale.

/ métal (MIM) horizontales[5]. La branche correspondant à la résonance dans le sillon en incidence normale, et dont la position du pic est indépendante de l'angle d'incidence, va suivre après l'anticroisement la ligne de diffraction du premier ordre. Dans le même temps, la branche supérieure, correspondant à la résonance induite par l'excitation des plasmons de surface par le premier ordre diffracté par le réseau, a le comportement inverse, en suivant jusqu'à l'anticroisement la loi $\lambda = d(1+\sin\theta)$ puis en restant constante ensuite à la longueur d'onde $\lambda = 3.5\mu$m, légèrement inférieure à la longueur d'onde de résonance de la cavité qui vaut $\lambda = 3.7\mu$m.

Pour les deux branches, aux angles supérieurs à 15°, la réflectivité dans l'ordre zéro est nulle aux deux résonances (*nota bene* : la troisième résonance liée à l'excitation des plasmons de surface par le deuxième ordre, visible sur le spectres à $\theta = 60°$ n'apparaît pas sur les cartes de réflectivité car elles ne sont pas assez résolues en longueur d'onde. Cette résonance a une largeur à demi-hauteur de l'ordre du nanomètre.) Nous avons vu dans les chapitres précédents que l'énergie était absorbée dans le cas de la résonance dans le sillon. Par ailleurs, lorsque les plasmons de surface sont excités par le réseau, une partie de l'énergie est redirigée de l'ordre 0 à l'ordre 1, et n'est donc pas absorbée.

Les figures 6.2b-c apportent des éléments de réponse à ce qu'il advient de l'énergie pour chacune des branches. Les cartes de diffraction de l'absorption dans le réseau d'une part et de l'intensité réfléchie vers l'ordre 1 sont tracées. Les deux branches gardent en fait leurs

[5] JOUY et al., « Coupling of a surface plasmon with localized subwavelength microcavity modes ».

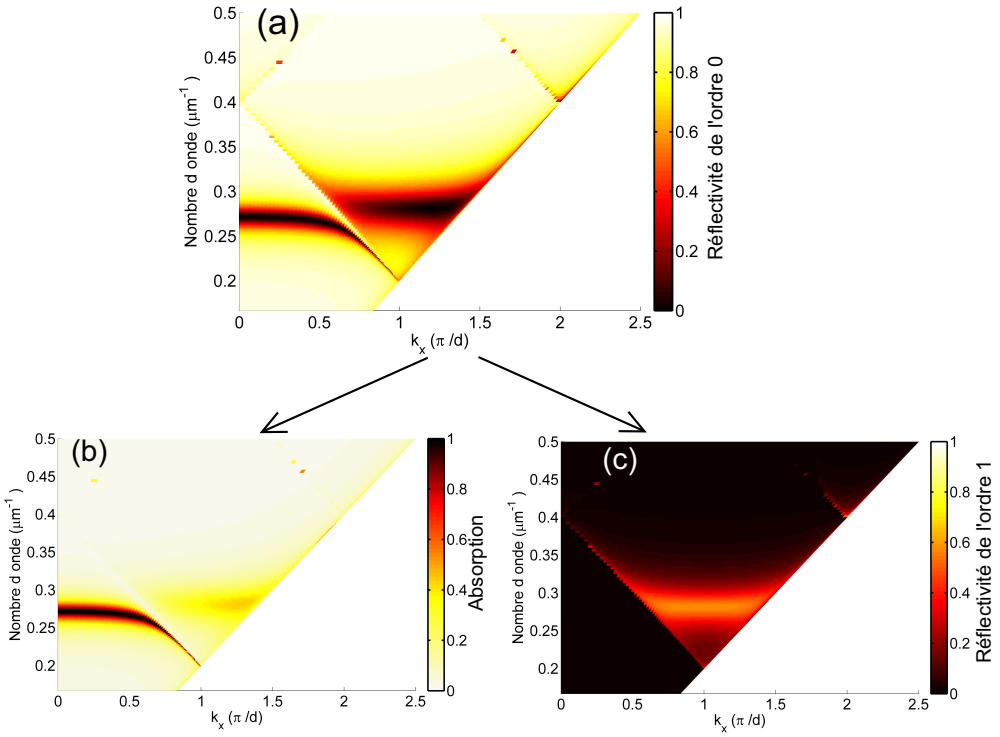

FIGURE 6.2 – (a) Carte de la réflectivité spéculaire du réseau de sillons en fonction du nombre d'onde $1/\lambda$ et du vecteur d'onde dans le plan k_x. Elle illustre le couplage entre la résonance de cavité ($1/\lambda = 0.27\mu\text{m}^{-1}$) et les plasmons de surface couplés par le réseau ($\frac{1}{\lambda} \simeq \frac{1}{d} - \frac{k_x}{2\pi}$). ordre diffractée par le réseau qui excite les plasmons de surface à la longueur d'onde $\lambda = d(1 + \sin\theta)$. Il y a un phénomène d'anticroisement entre les deux résonances : la branche supérieure à l'anticroisement suit aux faibles incidences la ligne de diffraction du premier ordre, puis reste après l'anticroisement à un nombre d'onde fixe $1/\lambda = 0.29\mu\text{m}^{-1}$ tandis que la branche inférieure a le comportement inverse. (b) Absorption dans le réseau métallique en fonction de $1/\lambda$ et k_x. Pour la branche inférieure à l'anticroisement, correspondant à la résonance de cavité, toute l'énergie est absorbée dans le sillon. Par contre, il n'y a qu'une légère absorption pour la branche supérieure ($\simeq 20\%$). (c) Carte d'intensité du premier ordre diffracté en fonction de $1/\lambda$ et k_x. L'énergie de la branche supérieure est diffractée à 80% vers le premier ordre, le reste étant absorbé.

propriétés respectives, la branche inférieure correspond à une absorption totale dans le réseau alors que dans la branche supérieure, quasiment toute l'énergie est diffractée vers l'ordre 1, une portion étant tout de même absorbée dans le métal. Ce qui est par contre remarquable est que les deux types de phénomène échangent après l'anticroisement non seulement leurs relations de dépendance avec l'angle d'incidence, mais également leurs facteurs de qualité qui semblent même être exaltés.

Dans le cas de la branche d'énergie diffractée, après l'anticroisement, la résonance devient plus large ($Q \simeq 6$) que la résonance de l'autre branche avant anticroisement ($Q \simeq 9$). Par ailleurs, la résonance est exaltée à partir de l'anticroisement, toute l'énergie incidente étant

soit réfléchie vers le premier ordre, soit absorbée dans le réseau. Après l'anticroisement, le réseau joue le rôle d'un séparateur de longueur d'onde : autour de 3.7μm, l'énergie est diffractée vers l'ordre 1 tandis que pour les autres longueurs d'onde, l'énergie est diffractée vers l'ordre 0.

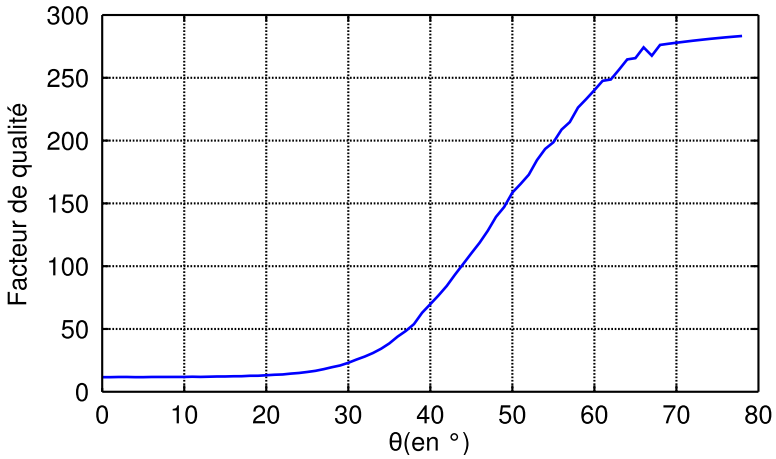

FIGURE 6.3 – Évolution du facteur de qualité de la résonance d'absorption (branche inférieure de l'anticroisement) en fonction de l'angle d'incidence. Le facteur de qualité reste stable jusqu'à 20° et le début du couplage. Il augmente ensuite pour atteindre des très grandes valeurs jusque $Q \simeq 400$ (ce qui correspond à des largeurs à demi-hauteur de quelques nanomètres.)

Dans le cas de la branche d'énergie absorbée, après l'anticroisement, la longueur d'onde de résonance dépend de l'angle d'incidence en suivant la formule du plasmon de surface $\lambda \simeq d(1 + \sin\theta)$. Par ailleurs, le facteur de qualité de la résonance augmente avec l'angle d'incidence. L'évolution du facteur de qualité en fonction de l'angle d'incidence entre 0° et 85° est montrée dans la figure 6.3. Le facteur de qualité reste stable jusque 20°. Il augmente ensuite du fait du couplage et atteint des très grandes valeurs de l'ordre de 300.

Je présente également le cas d'un réseau de sillons ayant sa résonance en bande 3 à $\lambda = 10.1\mu$m en incidence normale qui permet d'atteindre des facteurs de qualité encore plus élevés. Les plasmons ont une extension encore plus importante dans l'air à ces longueurs d'onde. Le réseau a une période de $d = 8\mu$m, et des sillons profonds de $h = 2\mu$m et larges de $w = 0.3\mu$m.

Pour conclure, nous avons mis en évidence le phénomène de couplage entre la résonance dans le sillon et la résonance des plasmons de surface. Ce couplage donne lieu a un anticroisement, où la branche supérieure correspond principalement à de l'énergie diffractée vers l'ordre 1 et la branche inférieure à de l'énergie absorbée dans le réseau. Après l'anticroisement, la branche d'énergie diffractée reste à une longueur d'onde constante et toute l'énergie est à la fois diffractée vers l'ordre 1 et absorbée dans le réseau ($\simeq 20$ %) tandis que la branche d'absorption suit la position $\lambda \simeq d(1 + \sin\theta)$ et voit le facteur de qualité de la résonance augmenter jusqu'à des valeurs records.

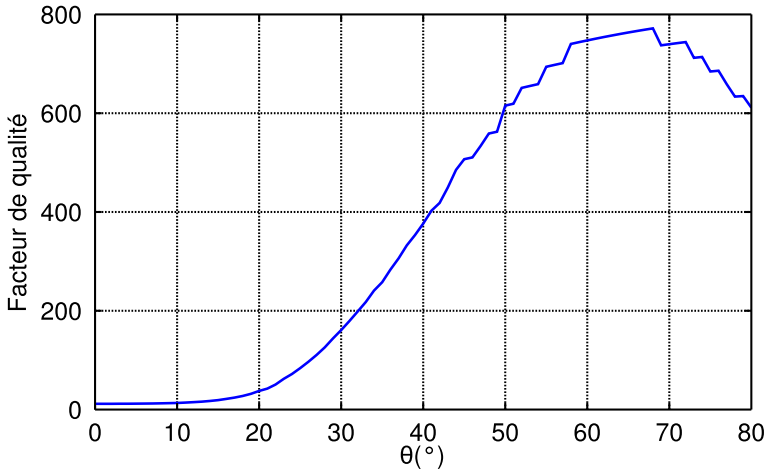

FIGURE 6.4 – Évolution du facteur de qualité de la résonance d'absorption (branche inférieure de l'anticroisement) en fonction de l'angle d'incidence pour un résonateur en bande 3. Le facteur de qualité augmente pour atteindre des valeurs supérieures à 800.

Dans la suite, on se concentre sur la résonance de la branche inférieure pour comprendre le rôle joué par les plasmons dans l'absorption.

6.1.2 Analyse énergétique de la résonance plasmonique à grand facteur de qualité

Nous reprenons dans cette partie la décomposition des termes énergétiques développée dans le chapitre 4 pour étudier le pic de résonance plasmonique à grand facteur de qualité et qui conduit à une absorption totale. Comme la position de ce pic suit la position de la résonance due aux plasmons de surface excités par le premier ordre de diffraction du réseau, on s'attend à ce que ces derniers jouent un rôle dans l'absorption différent de celui étudié dans le chapitre 4.

La figure 6.5 montre les lignes de flux des différents termes de la décomposition du vecteur de Poynting depuis la surface de la structure jusqu'à une distance $z = 12\mu$m dans l'air au pic de résonance $\lambda = 4.153\mu$m pour une incidence de 40°. Pour rappel, la structure a été dimensionnée pour qu'à la résonance, il n'y ait pas d'onde réfléchie (toute l'énergie est absorbée dans le métal) et dans un milieu non absorbant (ici l'air), chacun des termes de la décomposition du vecteur de Poynting a une divergence nulle et donc conserve le flux, ce qui la légitime. Dans la figure 6.5, entre deux lignes de flux, l'énergie est la même quel que soit le terme considéré. Le premier terme $S_i = E_i \times H_i$ correspond à l'énergie de l'onde incidente dans l'air. Le second terme $S_{ei} = E_e \times H_i + E_i \times H_e$ correspond à l'interférence entre l'onde incidente et le champ évanescent créé par la structure. Le dernier terme $S_e = E_e \times H_e$ donne les flux d'énergies dus aux ondes évanescentes et en particulier aux plasmons de surface. Les lignes de flux de $S_e = E_e \times H_e$ sont toutes horizontales, parallèles à la surface et sont plus

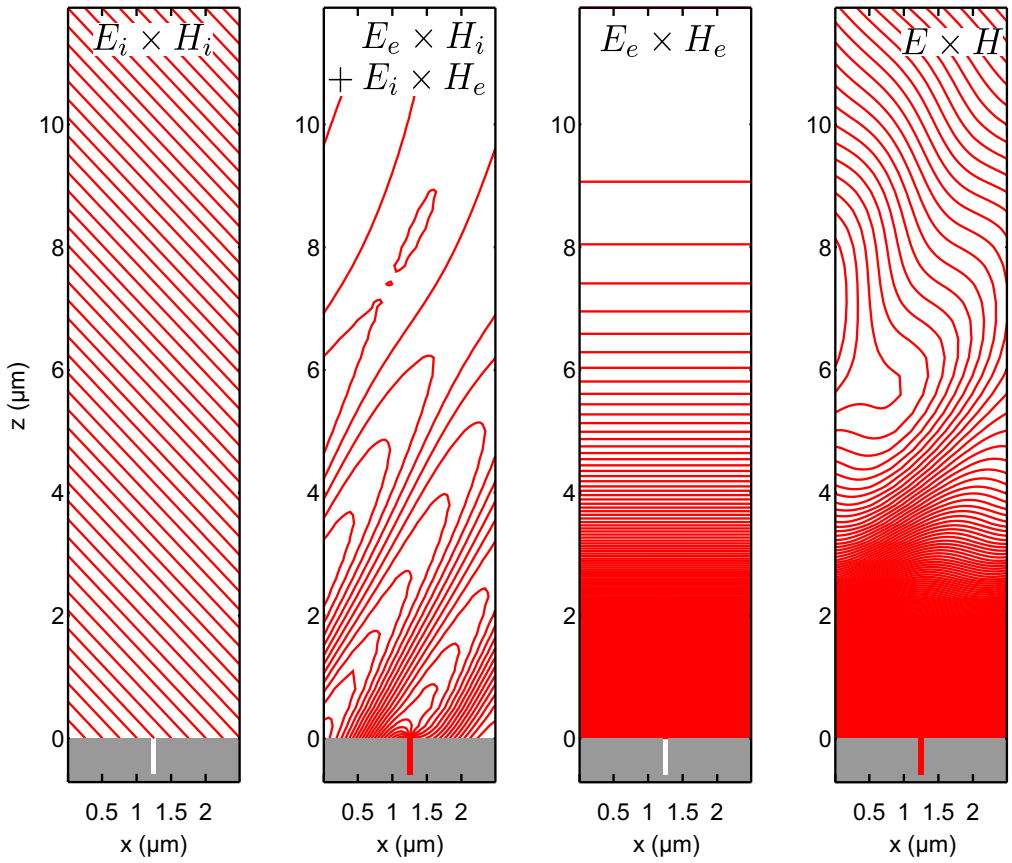

FIGURE 6.5 – Analyse énergétique du pic d'absorption le long de la droite du premier ordre diffracté. On se place à une incidence de 40°, la longueur d'onde de résonance est donc de $\lambda = 4.153\mu$m. On trace les différentes contributions. Le terme $E_e \times H_e$ contient les plasmons de surface qui se propagent à l'interface métal diélectrique.

resserrées que les lignes de S_i de la surface métallique jusqu'à $z = 6\mu$m. Elles se resserrent de plus en plus, de manière exponentielle, lorsqu'on se rapproche de la surface métallique, au point d'être indiscernables sur cette figure. Cette distribution d'énergie exponentielle, et sa direction de propagation horizontale évoquent bien entendu des plasmons qui se propagent sur la surface métallique. On définit la distance de pénétration du flux évanescent dans l'air δ^e_{air} comme la position z à laquelle les lignes de flux de S_e sont espacées de la même valeur que les lignes de flux de S_i. Dans le cas présent, $\delta^e_{air} = 6\mu$m et cette grandeur augmente lorsqu'on dimensionne le même type de structure en bande III. Enfin, on trace la somme de ces trois termes qui donnent le flux total de Poynting, et qui permet de voir à partir de quelle distance les plasmons de surface viennent perturber l'onde incidente. C'est le terme S_e qui domine proche de la surface ($z < 3\mu$m), les flux d'énergie se propageant principalement horizontalement à la surface et la densité d'énergie étant bien plus importante pour le terme S_e que pour S_{ei}.

Pour comprendre ce qui se passe à l'approche de la surface, on trace dans la figure 6.6 les mêmes termes, mais entre $z = 0\mu$m et $z = 0.7\mu$m. Par ailleurs, on ne prend pas la même

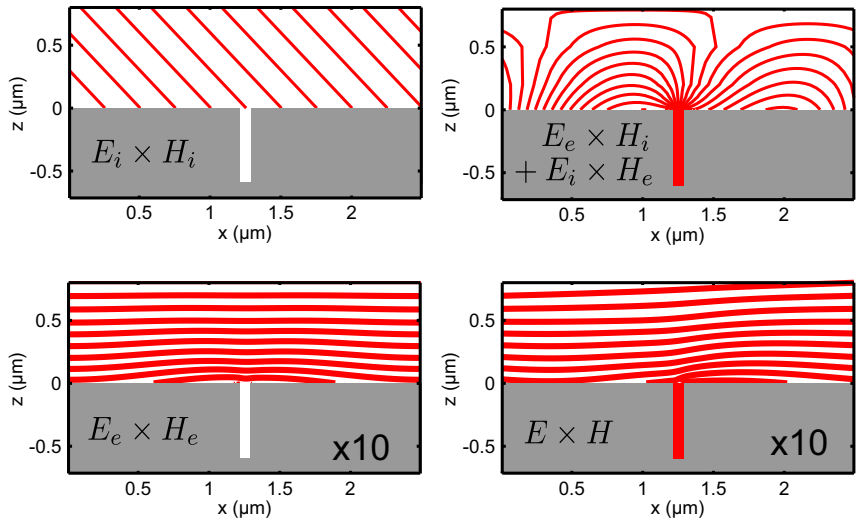

FIGURE 6.6 – Analyse énergétique du pic d'absorption à proximité de la surface. Les conditions sont les mêmes que dans la figure précédente, mais on peut distinguer ce qui se passe proche de la surface pour les figures (c) et (d). Les flux entre deux lignes sont dix fois plus importants dans le cas des figures (c) et (d) que dans le cas des figures (a) et (b).

échelle de flux entre deux lignes pour tous les termes. Dans le cas de $E_e \times H_e$ et $E \times H$, le flux est dix fois plus fort entre deux lignes que pour les deux autres termes. Comme vu au chapitre 4, c'est le terme d'interférence qui va concentrer l'énergie incidente vers le sillon où elle sera absorbée le long des parois métalliques. Par contre, il y a des plasmons qui se propagent sur la surface métallique, et ne font pas que rediriger le flux d'un côté à l'autre de la période.

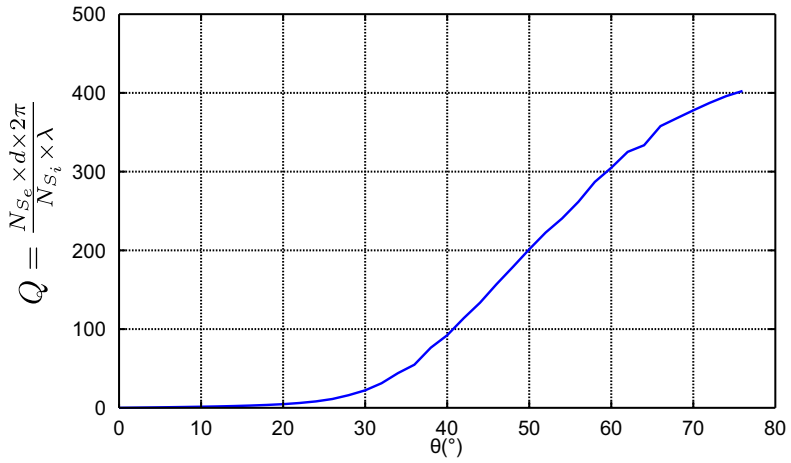

FIGURE 6.7 – Évolution de $Q = \frac{N_{S_e} \times d \times 2\pi}{N_{S_i} \times \lambda}$ en fonction de l'angle d'incidence (réseau de géométrie $w = 75$nm, $h = 600$nm et $d = 2.5\mu$m).

Les plasmons doivent jouer un rôle crucial sur le facteur de qualité de la résonance dans

le sillon. En effet, on peut définir le facteur de qualité comme :

$$Q = \frac{N_{S_e} \times d \times 2\pi}{N_{S_i} \times \lambda}, \tag{6.1}$$

où N_{S_i} est le nombre de lignes de flux de l'énergie incidente sur une période du réseau et N_{S_e} est le nombre de lignes de flux de S_e comprise entre la surface du réseau $z = 0$ et la valeurs $z = \delta^e_{air}$. Dans la figure 6.7, on trace l'évolution du facteur de qualité tel qu'il est défini dans la formule 6.1 en fonction de l'angle d'incidence pour le réseau précédemment défini en bande II ($w = 75$nm, $h = 600$nm et $d = 2.5\mu$m). On vérifie que l'évolution et les valeurs obtenues sont très proches de celles de la figure 6.3, ce qui confirme que ces très grandes valeurs du facteur de qualité sont dues à l'énergie stockée en champ proche, notamment dans les plasmons de surface excités par le réseau.

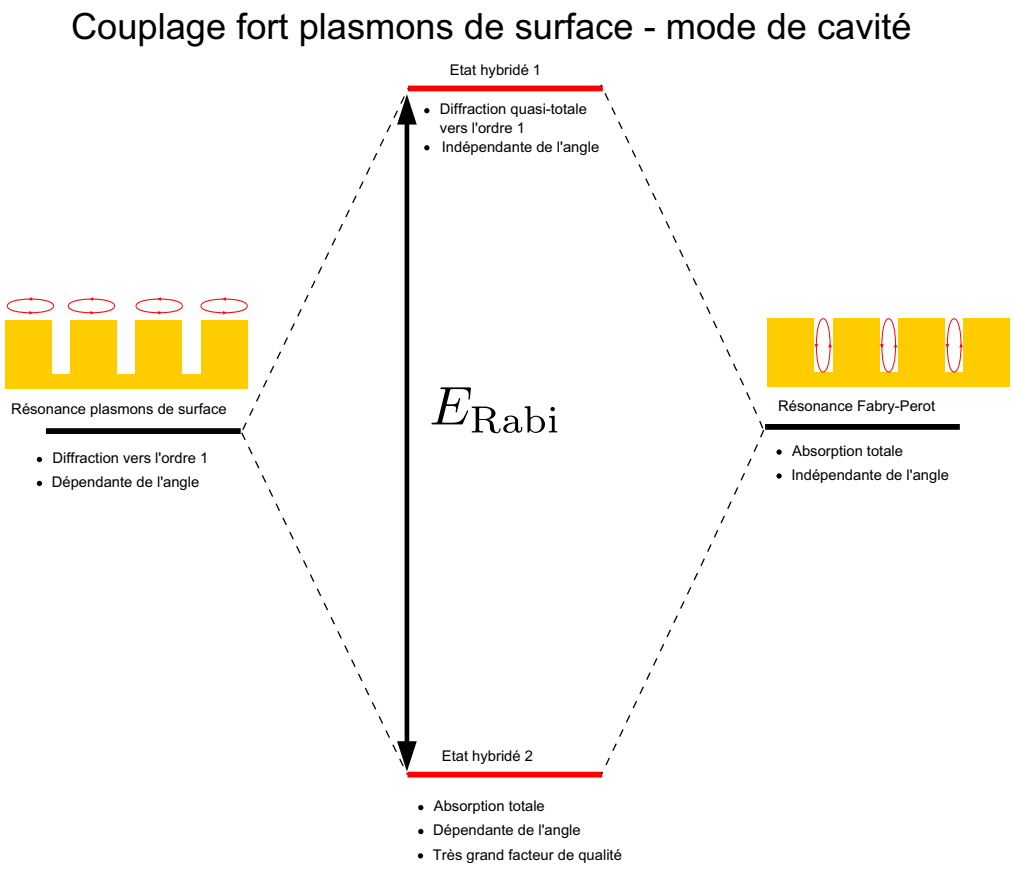

FIGURE 6.8 – Synthèse du régime de couplage fort. Lorsque les deux états de résonance ont une énergie proche, il y a apparition de deux nouveaux états hybridés caractéristiques du couplage fort.

La figure 6.8 fait le bilan du couplage fort décrit dans cette partie. Le réseau a deux états de résonances distincts pour les angles d'incidence faible : la résonance plasmonique qui diffracte une partie de l'énergie vers l'ordre 1 et qui dépend de l'angle d'incidence et la résonance de type Fabry-Perot dans le sillon qui absorbe totalement la lumière au pic de

résonance et ne dépend pas de l'angle d'incidence. Lorsque les deux états devraient avoir la même énergie, on rentre en régime de couplage fort, et deux nouveaux états hybridés apparaissent alors. L'état de plus grande énergie va diffracté de manière quasi-totale et indépendante de l'angle d'incidence l'énergie. Cet état pourrait être utilisé pour faire un dispositif optique qui renvoie l'énergie vers l'ordre un à une longueur d'onde donnée et vers l'ordre zéro autrement. L'état de plus faible énergie absorbe totalement la lumière à la résonance qui dépend de l'angle d'incidence. Par ailleurs, la résonance a un très grand facteur de qualité qui peut être utilisé dans les dispositifs de *sensing* pour scanner les longueurs d'onde avec une très grande finesse spectrale.

6.2 Couplage entre des résonateurs plasmoniques MIM verticaux

Le couplage entre des résonateurs verticaux a été étudié, aussi bien dans le cas de réseaux en réflexion qu'en transmission[6], mais ces travaux se concentraient sur des combinaisons de sillons ou fentes identiques. Il a été montré que cette association conduit à l'apparition de modes symétriques et antisymétriques, qui donnent lieu à des résonances de grands facteur de qualité ($Q \simeq 90$) dans les spectres en incidence normale pour les réseaux en transmission ou bien mènent à un champ électromagnétique très élevé. Dans cette partie, nous allons nous intéresser à des combinaisons de résonateurs de géométries différentes. Pour simplifier l'analyse, j'étudie en premier lieu le couplage entre deux sillons qui ont le même indice effectif (*i.e.* la même largeur). Grâce à ce couplage, il est possible d'élargir la bande d'absorption sans contrepartie. Je montre ensuite qu'on peut imaginer des structures absorbant sur une large bande en multipliant le nombre de résonateurs dans une période.

6.2.1 Couplage entre deux résonateurs de même indice effectif

Présentation de la structure bi-sillons

Nous allons nous intéresser au couplage entre des résonateurs plasmoniques verticaux. La structure considérée, présentée dans la figure 6.9, est constituée de deux sillons qui ont la même largeur $w_1 = w_2 = w$, mais des profondeurs h_1 et h_2 différentes. Les deux sillons sont par ailleurs séparés d'une distance l. La lumière incidente est polarisée TM, et arrive avec un angle θ. La structure étudiée dans cette partie a des sillons larges de $w = 75$nm espacés d'une distance $l = 500$nm dans une période $d = 2.5\mu$m.

[6] Le Perchec et al., « Controlling strong electromagnetic fields at subwavelength scales » ; Skigin et al., « Transmission resonances of metallic compound gratings with subwavelength slits ».

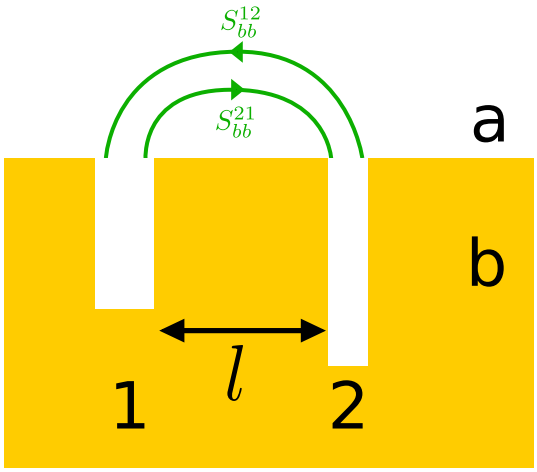

FIGURE 6.9 – Schéma de la structure réseau ayant 2 sillons par période d. Les sillons ont la même largeur w et des profondeurs respectives h_1 et h_2, ils sont espacés d'une distance l. Les deux éléments de matrice S (S_{bb}^{12} et S_{bb}^{21} correspondent au couplage de l'ensemble des modes 1 avec l'ensemble des modes 2).

Influence de la différence de profondeur des sillons

On sait que dans le cas de la structure à un sillon par période, la position de la résonance est donnée par la profondeur et l'indice effectif dans la fente. L'indice effectif dépend de la largeur du sillon. J'étudie dans un premier temps l'influence de la différence de profondeur entre les deux sillons, la distance entre eux étant fixée à $l = 500$nm (ce choix n'est pas arbitraire mais a été optimisé pour minimiser la réflectivité de la structure).

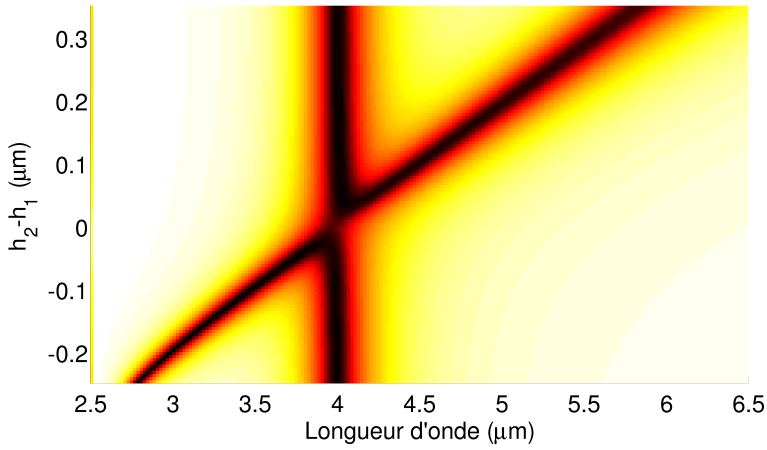

FIGURE 6.10 – Carte de réflectivité de 2μm à 6μm de la structure périodique à deux sillons en fonction de la différence entre les profondeurs des deux sillons $h_2 - h_1$, la profondeur du premier sillon étant fixe $h_1 = 650$nm, ainsi que la distance entre les deux sillons $l = 500$nm.

La carte de réflectivité entre $\lambda = 2\mu$m et $\lambda = 6\mu$m de la structures à deux sillons

en fonction de la différence entre les profondeurs $h_2 - h_1$ est tracée dans la figure 6.10. Le premier sillon a une profondeur fixe $h_1 = 650$nm, et résonne à une longueur d'onde $\lambda = 4\mu$m. Dès lors que la différence de profondeur entre les deux sillons est supérieure à 50nm, ils se comportent de manière indépendante. Lorsque h_2 se rapproche de la valeur de h_1, il y a un couplage faible entre les deux sillons, qui a pour effet de rapprocher légèrement la position de résonance des deux sillons.

Comme je l'ai précisé, la distance inter-sillons avait été optimisée. Ce paramètre a une influence très importante sur la réponse de la structure comme nous allons le voir.

Influence de la distance inter-sillons

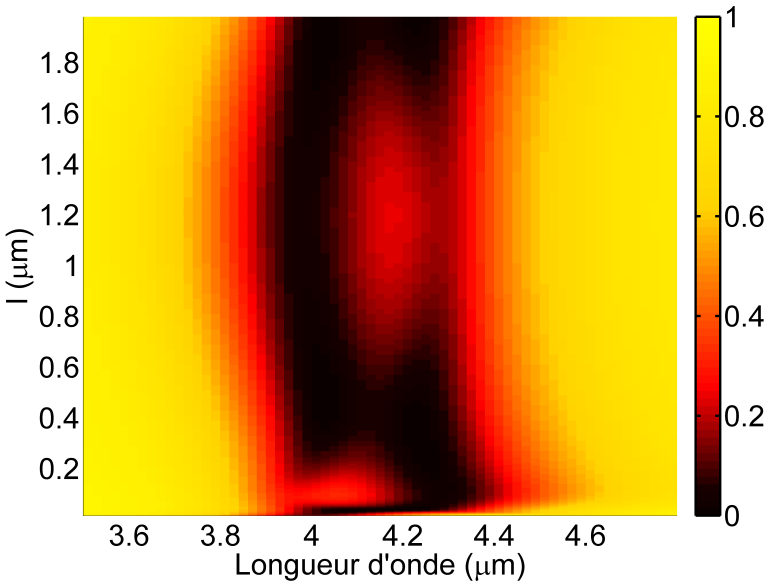

FIGURE 6.11 – Carte de réflectivité de 2μm à 6μm de la structure périodique à deux sillons en fonction de la distance inter-sillons l, les profondeurs des deux sillons sont $h_1 = 650$nm et $h_2 = 700$nm. L'onde est en incidence normale et polarisée TM. Comme attendu, le diagramme est symétrique par rapport à la ligne $l = 1.175\mu$m qui correspond à la valeur de $d/2 - w$.

Pour étudier l'influence de la distance inter-sillons l, on fixe la profondeur de chacun des sillons pour qu'ils aient des pics de résonance proches $h_1 = 650$nm et $h_2 = 700$nm (*i.e.* $h_2 - h_1 = 50$nm pour rester dans un régime où les sillons sont indépendants). Je trace la carte de réflectivité entre 2μm et 6μm en fonction de la distance l entre les sillons dans la figure 6.11. Elle est symétrique par rapport à la droite $l = (d - 2w)/2 = 1.175\mu$m. Si les positions des deux pics de résonance ne varient que peu en fonction de l, il apparaît clairement que l'amplitude des résonances dépend de l. En effet, pour 60nm $< l <$ 200nm, le premier sillon absorbe moins de 80% de la lumière à $\lambda = 4\mu$m. De même, pour 0.8μm $< l < 1.6\mu$m, c'est le deuxième sillon qui absorbe moins de 80% de la lumière à la longueur d'onde de résonance $\lambda = 4.25\mu$m.

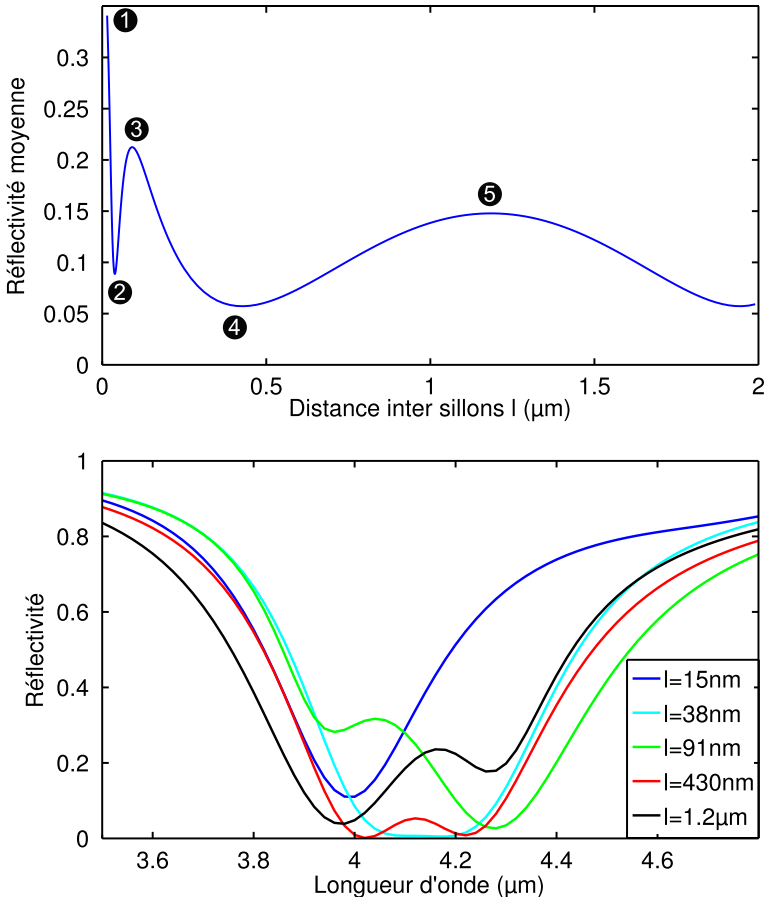

FIGURE 6.12 – (a) Réflectivité moyenne entre $\lambda = 3.9\mu$m et $\lambda = 4.3\mu$m en fonction de la distance l pour les deux sillons de profondeurs $h_1 = 650$nm et $h_2 = 700$nm. Les positions du maximum de la courbe et des quatre extrema locaux sont indiqués par les nombres de 1 à 5, et les spectres de réflectivité correspondants sont tracés dans (b). La réflectivité moyenne est minimale dans les cas où $l = 38$nm et $l = 430$nm.

On a vu dans la figure 6.11 que quelle que soit la distance l, les résonances restent dans la même gamme de longueur d'onde entre $\lambda_1 = 3.9\mu$m et $\lambda_2 = 4.3\mu$m. Une fonction de mérite qui paraît alors intéressante pour caractériser la distance l optimale est la réflectivité moyenne obtenue entre ces deux longueurs d'onde $f = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R/(\lambda_2 - \lambda_1)$. On trace l'évolution de f en fonction de la distance l dans la figure 6.12a pour des valeurs variant de 15nm à 2μm (la courbe est symétrique au delà de $l = 1.175\mu$m). Il y a cinq positions caractéristiques sur cette courbe, correspondant au maximum à $l = 15$nm et à quatre extrema locaux positionnés à $l = 38$nm, $l = 91$nm, $l = 430$nm et $l = 1.2\mu$m. Les spectres correspondant à ces cinq distances inter-sillons sont représentés dans la figure 6.12b. Pour $l = 15$nm, on voit qu'il n'y a qu'une seule résonance qui n'atteint que 90%. On reviendra sur ce régime de couplage particulier (en effet, puisque $l < \delta_m$, où δ_m est l'épaisseur de peau qui vaut 25 nm pour l'or dans l'infrarouge, il y a couplage non seulement via la surface du réseau, mais également à travers le mur de métal). Aux positions $l = 91$nm et $l = 1.2\mu$m, la résonance de chacun

des deux sillons est visible, mais aucune des deux résonances n'est optimisée. Dans les deux cas, il y a une des deux résonances qui absorbe moins de 80% de la lumière incidente à la position du pic. Pour $l = 430$nm, on atteint un optimum pour lequel aux deux pics de résonance, l'absorption est quasi-totale. Par ailleurs, il faut noter qu'une variation de 100nm sur la valeur de l dégrade peu la qualité de la réponse optique.

Enfin, on a un autre cas où il y a absorption quasi-totale de la lumière à une longueur d'onde, lorsque $l = 38$nm. Comme dans le premier cas, on se trouve dans un régime où il y a couplage à travers le mur de métal ($l \simeq \delta_m$ avec $\delta_m = 25nm$). Par ailleurs, on ne distingue qu'une seule résonance mais qui présente une largeur du pic pour lequel l'absorption dépasse 90 % supérieure à 300nm. En fait, ce couplage sub-épaisseur de peau a pour effet de rapprocher les positions des deux résonances, on se retrouve ainsi dans le régime où les deux positions ne sont plus discernables (voir figure 6.10). Si on augmente l'écart entre les profondeurs des deux sillons, on obtiendra à nouveau deux résonances dont les pics atteindront une absorption quasi-totale.

6.2.2 Absorbant large bande

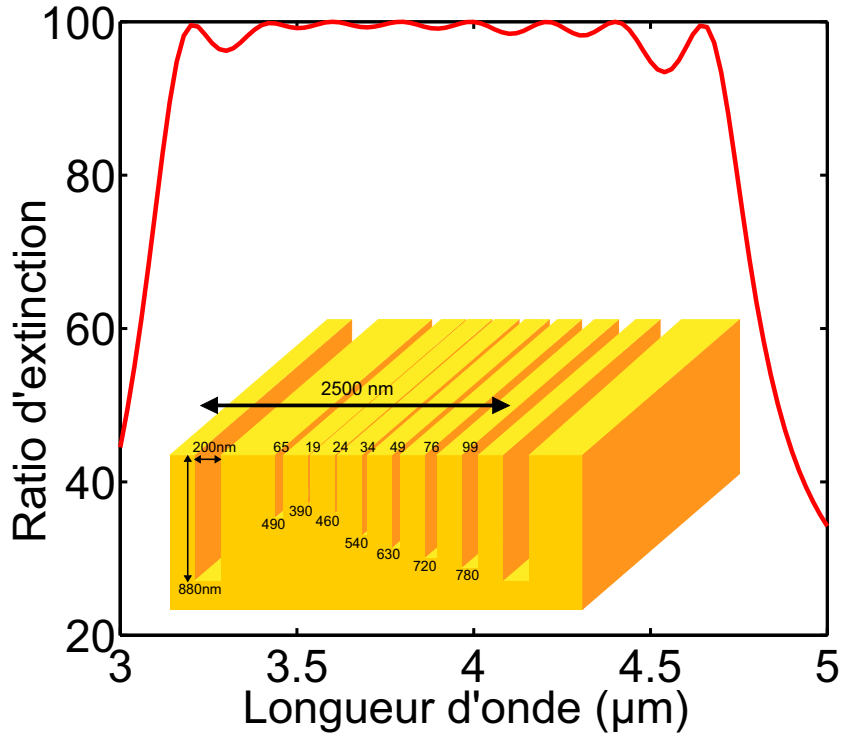

FIGURE 6.13 – Spectre de réflectivité d'une structure à 8 sillons par période optimisée pour absorber en bande 2.

On a montré qu'il était possible de combiner dans une même période deux sillons de

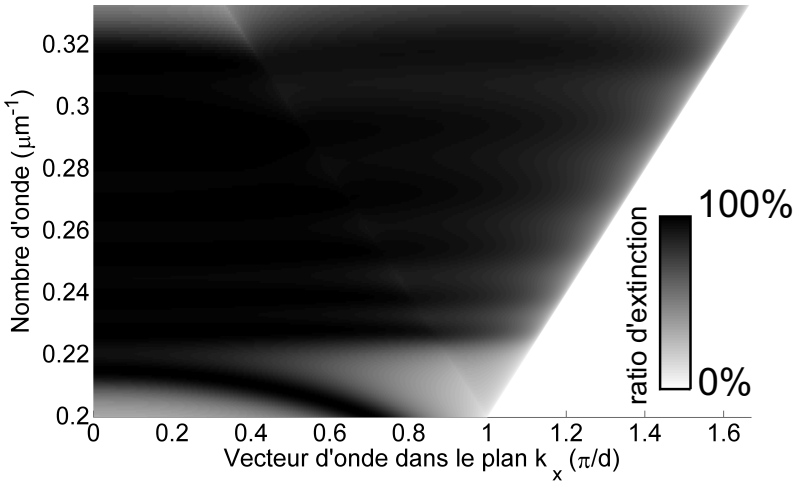

FIGURE 6.14 – Diagramme de réflectivité de la structure à 8 sillons entre $\lambda = 3\mu$m et $\lambda = 5\mu$m. La réponse de la structure est quasiment insensible à l'angle d'incidence.

géométrie différentes pour élargir la bande d'absorption. Nous poussons ici l'exercice en combinant huit résonateurs sillons. La réponse de la structure optimisée en incidence normale avec une polarisation TM en bande 2 est présentée dans la figure 6.13. Toute l'énergie est absorbée entre $\lambda = 3.2\mu$m et $\lambda = 4.6\mu$m. L'influence de chaque résonateur est marquée par un quasi-zéro de réflectivité. La structure simulée est présentée en insert, elle est de période $d = 2.5\mu$m pour éviter la perturbation des plasmons de surface pour les angles d'incidence plus élevés. Les ouvertures des sillons occupent moins du quart de la surface du dispositif. On vérifie dans la figure 6.14 que cette structure 8 sillons a une réponse quasiment insensible à l'angle d'incidence.

On vient de montrer qu'il était possible de fabriquer une structure multi-résonateurs plasmoniques se comportant comme une antenne large bande. La fabrication d'une telle structure nécessite des développements technologiques très lourds, mais dans le chapitre 10, nous présenterons quelques pistes de simplification de cette structure pour une potentielle réalisation en salle blanche. En particulier, on peut obtenir un absorbant large bande avec 3 résonances en combinant des sillons de même profondeur, et on peut réduire la profondeur des sillons en les remplissant d'un matériau à fort indice.

6.3 Couplage entre des résonateurs MIM plasmoniques horizontaux : application au tri de photons

6.3.1 Les structures métal/isolant/métal horizontales

Nous avons étudié jusqu'ici des résonateurs MIM verticaux. Il existe une alternative proposée en 2006 qui consiste à empiler les couches métal/isolant/métal (MIM) horizontalement[7]. La structure MIM horizontale est décrite dans la figure 6.15a. Nous avons choisi comme isolant le sulfure de Zinc qui a le double avantage de pouvoir être déposé en couche mince au LPN et de garder un indice quasi-constant dans tout l'infrarouge $n_{\mathrm{ZnS}} = 2.2$ d'après les données de la bibliographie[8]. Les structures MIM étudiées dans la suite seront de type Au/ZnS/Au, constituées d'un ruban bicouche de sulfure de zinc et d'or, d'épaisseurs respectives h_{ZnS} et h_{Au}. Ce ruban de largeur w est déposé périodiquement (période d) sur une couche épaisse d'or assimilable à un substrat massif.

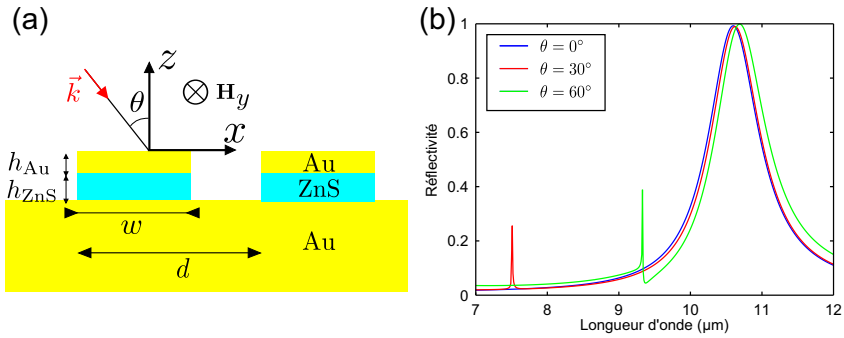

FIGURE 6.15 – (a) Schéma de la structure MIM, où le métal est de l'or et l'isolant du ZnS. La couche métallique du bas est suffisamment épaisse pour être considérée comme un substrat d'or. Le motif est répété avec la période d et est constitué d'un ruban bicouche ZnS/Au, de largeur w et d'épaisseurs respectives h_{ZnS} et h_{Au}. (b) Spectre de réflectivité d'une structure MIM optimisée avec $d = 5\mu$m, $w = 2\mu$m, $h_{\mathrm{ZnS}} = 150$nm et $h_{\mathrm{Au}} = 50$nm.

Le modèle de Drude utilisé pour modéliser l'or est toujours sous la forme $\epsilon(\lambda) = 1 - [(\lambda_p/\lambda + i\gamma)\lambda_p/\lambda]^{-1}$, avec $\lambda_p = 159$nm et $\gamma = 0.0048$. La valeur du terme γ est modifiée par rapport au structures sillons, afin de faire concorder les résultats théoriques et expérimentaux obtenus sur les structures MIM à la fin de ce chapitre. Les spectres d'absorption d'une structure MIM optimisée pour avoir 100% d'absorption à la résonance sont tracés dans la figure 6.15b pour plusieurs angles d'incidence avec les paramètres $d = 5\mu$m, $w = 1.8\mu$m, $h_{\mathrm{ZnS}} = 150$nm et $h_{\mathrm{Au}} = 50$nm. Le phénomène responsable de la résonance d'absorption est analogue à celui étudié dans le cas du sillon : la couche de sulfure de zinc est un guide d'onde dans lequel le mode guidé va faire des allers-retours à l'instar d'une cavité Fabry-Perot. La

[7] HAO et al., « High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial » ; KUROKAWA et al., « Metal-insulator-metal plasmon nanocavities: Analysis of optical properties » ; LE PERCHEC et al., « Plasmon-based photosensors comprising a very thin semiconducting region » ; LÉVÊQUE et al., « Tunable composite nanoparticle for plasmonics ».

[8] PALIK et al., *Handbook of optical constants of solids.*

condition de résonance est donc fixée par $\lambda_{pic} \simeq 2n_{\text{eff}}w$. Par ailleurs, on voit que la résonance est indépendante de l'incidence, comme dans le cas des réseaux de sillons. A une incidence de 60°, la position du pic est légèrement décalée, mais il y a toujours absorption totale. Ce léger décalage est lié au début du couplage entre le plasmon de surface air/Au dont la résonance apparaît à $\lambda = 9.4\mu$m et le mode de résonance du MIM.

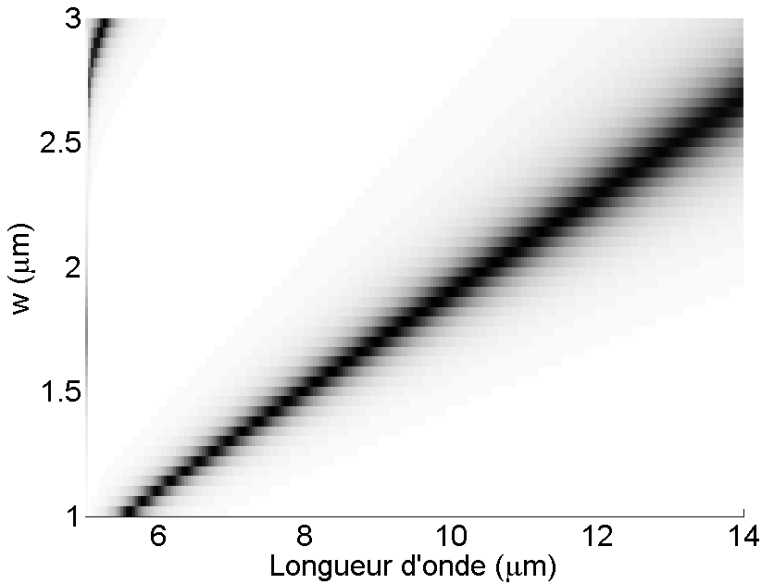

FIGURE 6.16 – Carte de la réflectivité en fonction de la largeur du plot w. La période et les épaisseurs sont fixes ($d = 5\mu$m, $h_{\text{ZnS}} = 150$nm et $h_{\text{Au}} = 50$nm). Comme prévu, la relation entre la position du pic de résonance et la largeur de la fente est linéaire.

Dans la figure 6.16, on trace la carte de la réflectivité en fonction de la largeur du ruban w, la période et les épaisseurs des couches étant fixes ($d = 5\mu$m, $h_{\text{ZnS}} = 150$nm et $h_{\text{Au}} = 50$nm). On distingue très clairement l'évolution de la position du pic de résonance en fonction de la largeur du ruban. Le pic de résonance dépend linéairement de la largeur du MIM $\lambda_{pic} = 2n_{\text{eff}}w + \phi$. On peut donc extraire les valeurs de l'indice effectif et de la phase pour le réseau :

$$\boxed{\begin{array}{c} n_{\text{eff}} = 2.5 \\ \phi = 0.5\mu\text{m} \end{array}}$$

La valeur de l'indice effectif est cohérent avec ce qu'on trouvait dans le cas d'un sillon Au/ZnS/Au large de 150nm (voir chapitre 2).

6.3.2 Couplage entre les résonateurs MIM

Nous avons vu qu'il était possible de juxtaposer plusieurs résonateurs MIM type sillon dans une période, et que cela conduisait à un élargissement la bande d'absorption. Par ailleurs, on vient de montrer que les résonateurs MIM type ruban avaient une réponse optique similaire

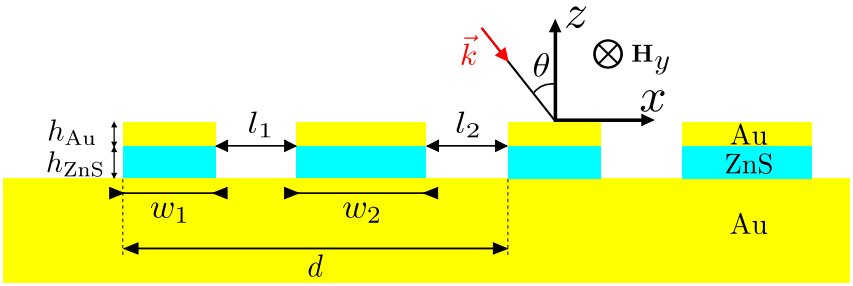

FIGURE 6.17 – Schéma de la structure biMIM. La couche d'or continue du bas a une épaisseur de 200 nm. La structure est composée de deux rubans par période constitués d'un empilement d'une couche de ZnS et d'une couche d'or (d'épaisseurs respectives $h_{\mathrm{ZnS}} = 150$nm et $h_{\mathrm{Au}} = 50$nm). La période est fixée à $d = 5\mu$m. Enfin, les rubans ont des largeurs w_1 et w_2 et sont séparés d'une distance l.

aux résonateurs sillons. Il est donc naturel de chercher à juxtaposer deux résonateurs MIM ruban dans la même période. Le schéma de la structure à deux MIM par période, que nous appelons dans la suite biMIM, est présenté dans la figure 6.17. Comme dans le cas de la combinaison de sillons, l'indice effectif est le même dans chacun des MIM (*i.e.*, les épaisseurs des MIM sont identiques, ce qui facilite leur fabrication). On fixe la période à $d = 5\mu$m et les épaisseurs des couches des rubans à $h_{\mathrm{ZnS}} = 150$nm et $h_{\mathrm{Au}} = 50$nm. Les rubans ont des largeurs w_1 et w_2 et sont séparés d'une distance l.

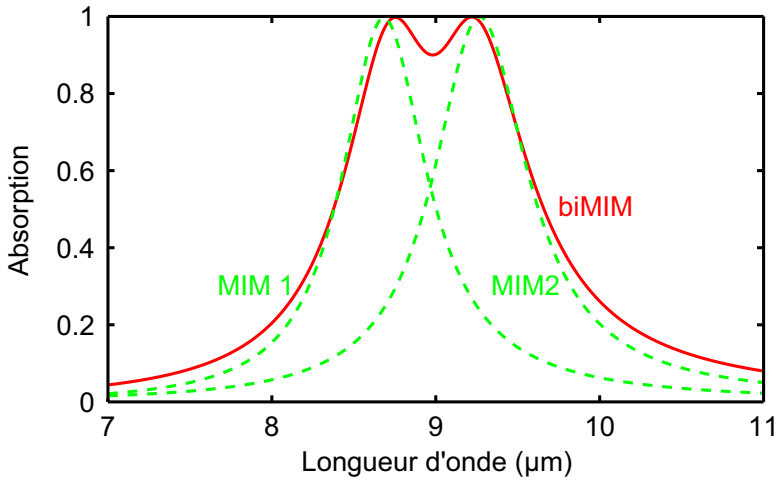

FIGURE 6.18 – Comparaison des spectres théoriques d'absorption des structures MIM rubans (courbes vertes pointillées) de largeur $w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m et de la structure biMIM (courbe rouge pleine) qui combine les deux rubans MIM dans la même période.

Le spectre de réflectivité de la structure biMIM, dans le cas où on a $w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m et $l = (d - w_1 - w_2)/2$, est tracé dans la figure 6.18 (courbe rouge pleine). Comme dans le cas de la structure deux sillons, on a un élargissement de la bande d'absorption. On distingue les deux pics de résonance de chaque ruban MIM à $\lambda_r^1 = 8.75\mu$m et $\lambda_r^2 = 9.22\mu$m,

l'absorption étant quasi-totale à ces deux longueurs d'onde. Par ailleurs, on trace également les spectres de réflectivité des rubans MIM individuels (période $d = 5\mu$m, $w = 1.625\mu$m dans le premier cas et $w = 1.74\mu$m dans le second cas). Les positions des pics de résonance des MIM uniques $\lambda_r^1 = 8.68\mu$m et $\lambda_r^2 = 9.27\mu$m sont légèrement décalées par rapport aux positions obtenues pour le biMIM. Les deux résonateurs MIM sont quasiment indépendants, mais il y a tout de même un phénomène de couplage qui perturbe légèrement la position des résonances. Nous allons étudier en détail l'influence des paramètres géométriques sur ce couplage, et le comparer au couplage dans le cas des structures bi-sillons.

6.3.3 Influence de la géométrie du biMIM sur le couplage

Influence de la distance inter-MIM

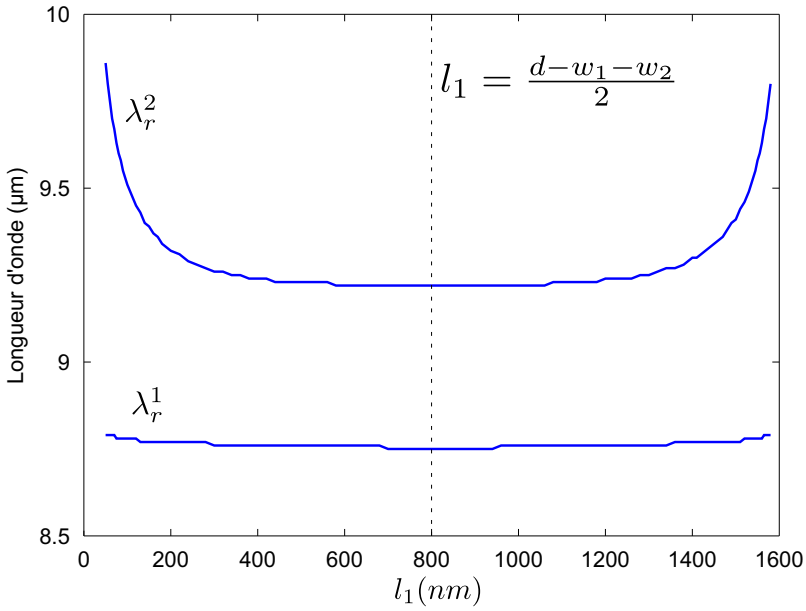

FIGURE 6.19 – Évolution des deux longueurs d'onde de résonance du biMIM en fonction de la distance entre les deux MIM l_1. La période et les épaisseurs valent toujours $d = 5\mu$m, $h_{\mathrm{ZnS}} = 150$nm et $h_{\mathrm{Au}} = 50$nm. Les rubans sont de largeur $w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m.

Nous débutons l'étude du couplage par l'influence de la distance inter-MIM l_1. La figure 6.19 donne l'évolution de la position des deux longueurs d'onde de résonance dans le cas où les rubans sont de largeur $w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m. Sans surprise, la courbe est symétrique au delà de $l_1 = (d - w_1 - w_2)/2$. Les résonances du biMIM sont fixes tant que la distance inter-MIM reste comprise entre 400nm et 1200nm. Au delà de ces valeurs, la première résonance reste presque fixe à $\lambda_r^1 = 8.7\mu$m alors que la position de la deuxième résonance est déplacée de $\lambda_r^2 = 9.3\mu$m à $\lambda_r^2 = 9.8\mu$m. Ce phénomène donne une indication de l'extension des champs en dehors de chaque ruban. La présence d'un second ruban perturbe le premier s'il est situé à moins de 200 nm. Il est possible d'imaginer un dispositif tirant

partie de cet effet, où il suffirait de déplacer deux peignes interdigités de rubans MIM l'un par rapport à l'autre pour sonder une plus grande bande spectrale.

Influence de la différence de largeur des MIM

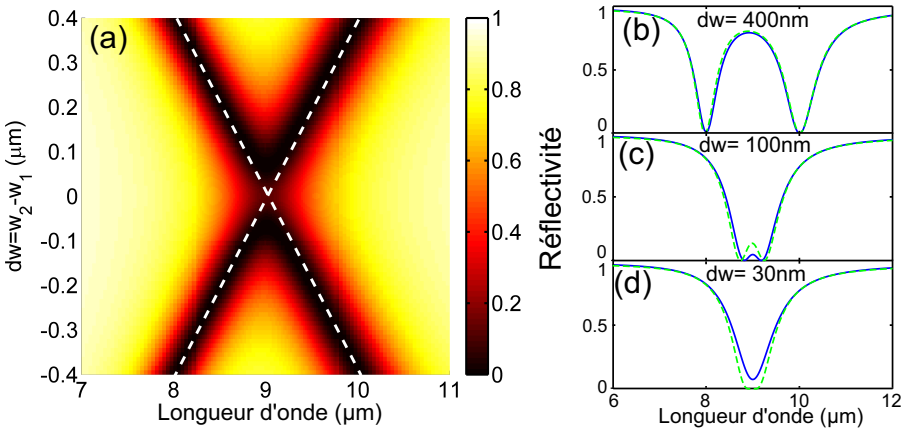

FIGURE 6.20 – (a) Carte de réflectivité du biMIM en fonction de $\mathrm{d}w = w_2 - w_1$ où $w_1 = W - \mathrm{d}w/2$, $w_2 = W + \mathrm{d}w/2$ et $W = 1.685\mu$m. L'onde est polarisée TM et arrive en incidence normale sur le réseau. Les lignes blanches pointillées correspondent à la position du pic de résonance des structures MIM simples. Les spectres de réflectivité des structures biMIM (courbes bleues) sont comparés au produit de réflectivité des structures MIM simples (courbes vertes pointillées) pour les valeurs (b) $\mathrm{d}w = 400$nm, (c) $\mathrm{d}w = 100$nm et (d) $\mathrm{d}w = 30$nm.

Pour étudier le couplage entre deux résonateurs, on compare différentes structures biMIM aux résonateurs MIM simples. La figure 6.20a représente la carte de réflectivité dans le plan ($\mathrm{d}w$, λ) où $\mathrm{d}w$ est la différence de largeur entre les deux rubans MIM ($w_1 = W - \mathrm{d}w/2$, $w_2 = W + \mathrm{d}w/2$ et $W = 1.685\mu$m). Deux bandes d'absorption totales, avec un croisement à $\mathrm{d}w = 0$, sont clairement observées et peuvent être attribuées à la résonance de type Fabry-Perot dans chacun des rubans. Les lignes blanches pointillées représentent les longueurs d'onde de résonance λ_r des structures MIM simples pour les largeurs w_1 et w_2. En dehors de $\mathrm{d}w = 0$, les spectres de réflectivité des structures biMIM sont bien décrits par le produit de réflectivité de deux structures simples MIM, $R = R_1 R_2$ comme on peut le voir sur les figures 6.20b-d. Du point de vue des probabilités d'absorption de photons, cela signifie que la probabilité R qu'un photon arrivant sur la structure soit absorbé est le produit des probabilités indépendantes R_1 et R_2. Les rubans de la structure biMIM sont des résonateurs découplés. En conséquence, toute déviation à la relation $R = R_1 R_2$ correspond à un couplage entre les résonateurs. Pour les grandes valeurs de $\mathrm{d}w$, le modèle correspond parfaitement au comportement du biMIM. Dès que $\mathrm{d}w$ diminue (typiquement $\mathrm{d}w \leq 100$nm), le léger désaccord observé dans les figures 6.20c et 6.20d prouve qu'il y a un faible couplage qui conduit à un changement de nature de la résonance. Lorsque $\mathrm{d}w \lesssim 150$nm), il y a dégénérescence des résonances et il n'existe plus qu'un seul pic.

6.3.4 Fabrication et caractérisation de multi-résonateurs MIM horizontaux

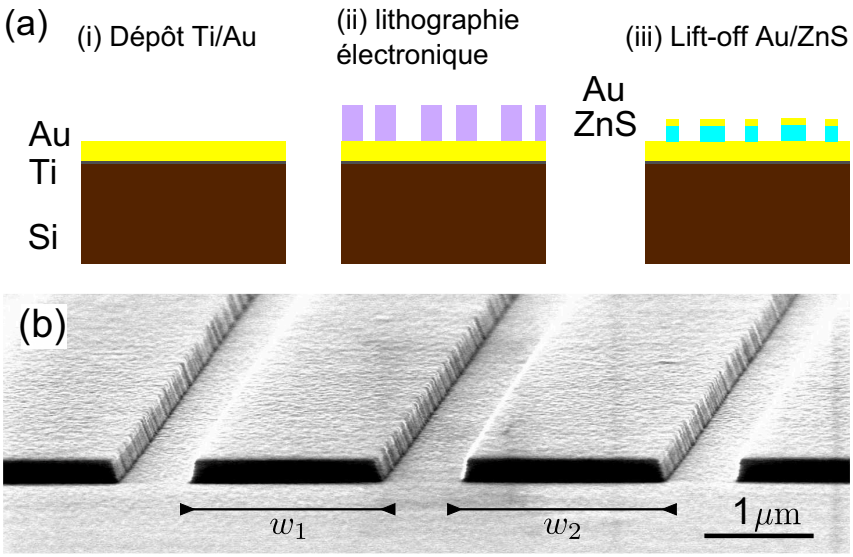

FIGURE 6.21 – (a) Principe de la fabrication des structures biMIM. (i) On fait un dépôt d'or épais (200nm) avec une couche d'accroche de titane (20nm) sur un substrat de silicium. (ii) On fait une lithographie électronique d'une résine PMMA A7 épaisse. (iii) On fait un lift d'un dépôt ZnS/Au.s (b) Image MEB d'un échantillon biMIM ($w_1 = 1.625\mu$m and $w_2 = 1.74\mu$m)).

Le principe de la fabrication des structures biMIM est présenté dans la figure 6.21a. On commence par effectuer un dépôt de 200nm d'or avec une couche d'accroche de titane de 20nm sur un substrat de silicium. Une résine PMMA A7 épaisse ($\simeq$ 500nm) est ensuite enduite sur l'échantillon, puis insolée en lithographie électronique par le masqueur Vistec Leca à 100kV (voir le chapitre 3 pour les détails sur l'utilisation du masqueur électronique). Après développement, une couche de ZnS d'épaisseur 150nm est déposée par évaporation. L'épaisseur et l'indice optique de la couche diélectrique dans le visible sont contrôlés par un ellipsomètre (UV-NIR Jobin-Yvon Uvisel) in situ. Une couche d'or de 50nm est déposée par dessus la couche de ZnS. Enfin, on obtient les rubans de ZnS/Au par lift-off dans du diméthyl sulfoxyde (DMSO) à une température de 170°C. Une image au microscope électronique à balayage (MEB) est présentée en figure 6.21b, on distingue clairement les deux couches (la couche d'or est plus claire que la couche de ZnS). On voit que les deux rubans n'ont pas les mêmes largeurs ($w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m).

Nous avons fabriqué deux réseaux avec des largeurs de rubans différentes, mais les mêmes épaisseurs de couches (les deux réseaux ont été fabriqués sur le même échantillon) et la même période d. Pour le réseau A, les largeurs des rubans MIM sont $w_1 = 1.625\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m, et pour le réseau B, on a $w_1 = 1.88\mu$m et $w_2 = 1.99\mu$m. On s'attend donc à ce que le réseau B ait des résonances à des longueurs d'ondes plus élevées que le réseau A puisque $\lambda_{pic} \simeq 2n_{\text{eff}}w$. Les spectres de réflectivité ont été mesurés avec un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) Brucker Vertex 70v incluant un module de mesure de

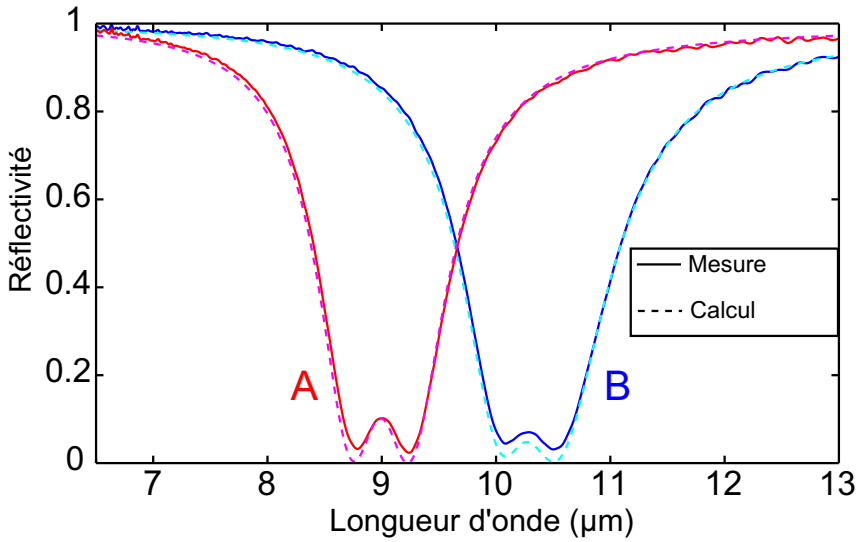

FIGURE 6.22 – Spectres de réflectivité d'une onde plane polarisée TM incident sur le réseau avec un angle de 13° mesuré (lignes pleines) et calculées (lignes pointillées) pour les réseaux A (courbes rouges) et B (courbes bleues).

la réflectivité angulaire. Les spectres mesurés à une incidence de 13° en polarisation TM sont tracés dans la figure 6.22. Comme prévu théoriquement, on observe un élargissement de l'absorption, et on a bien les pics de résonances de chacun des MIM menant à une absorption quasi-totale ($\simeq 95\%$) de la lumière. Ainsi, les réseaux A et B absorbent plus de 90% de la lumière sur une bande spectrale de $\Delta\lambda \simeq 600$nm, centrée sur $\lambda = 9\mu$m pour A et $\lambda = 10.5\mu$m pour B. Les courbes expérimentales (lignes pleines dans la figure) sont parfaitement décrites par les courbes théoriques calculées avec le code de simulation BMM (lignes en pointillées) à condition d'adapter les paramètres du modèle de Drude, en prenant *paradoxalement* en compte moins de pertes par rapport à ce qui est prévu dans les données bibliographiques[9] (qui n'indique que peu de valeurs entre 8μm et 10μm et aucune au-delà, ce qui peut expliquer cette différence). La fabrication de ces deux réseaux montre qu'il est possible d'obtenir des absorbants large bande en jouant uniquement sur les largeurs des rubans, les autres paramètres étant fixés (notamment les épaisseurs de couche). Il est donc possible de fabriquer un grand nombre de réseaux aux propriétés différentes en une seule étape.

On étudie le comportement angulaire de 13° à 70° de la réflectivité du réseau B dans la figure 6.23. Les positions des deux résonances ne dépendent pas de l'angle d'incidence θ, ce qui s'explique par le fait qu'elles sont dues à des résonances de Fabry-Perot localisées. La position de chacune des résonances ne dépend donc que de la largeur du MIM et de l'indice effectif dans la couche diélectrique. Par ailleurs, comme on le voit dans la figure 6.23b, les valeurs de la réflectivité aux résonances sont quasi constantes jusqu'à $\theta = 40°$ puis augmentent faiblement.

[9] PALIK et al., *Handbook of optical constants of solids.*

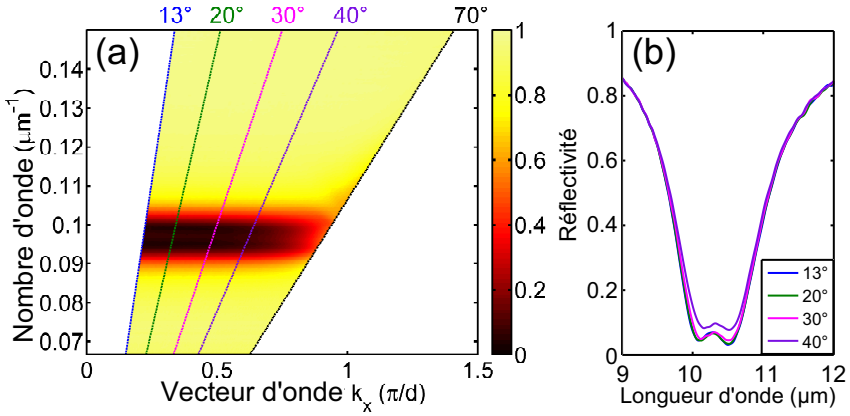

FIGURE 6.23 – (a) Diagramme de dispersion de l'échantillon B pour les angles de 13° à 70° à des longueurs d'onde entre 6.6μm et 15μm. Les positions des résonances sont indépendantes de l'angle d'incidence. Par ailleurs, il n'y a aucun signe visible de la résonance plasmonique excitée par le premier ordre diffracté par le réseau. (b) Spectres de réflectivité du réseau B pour différents angles. La réflectivité reste faible pour des angles allant jusque 40° entre 9.8μm et 10.5μm.

6.3.5 Application au tri de photons indépendant de l'angle d'incidence

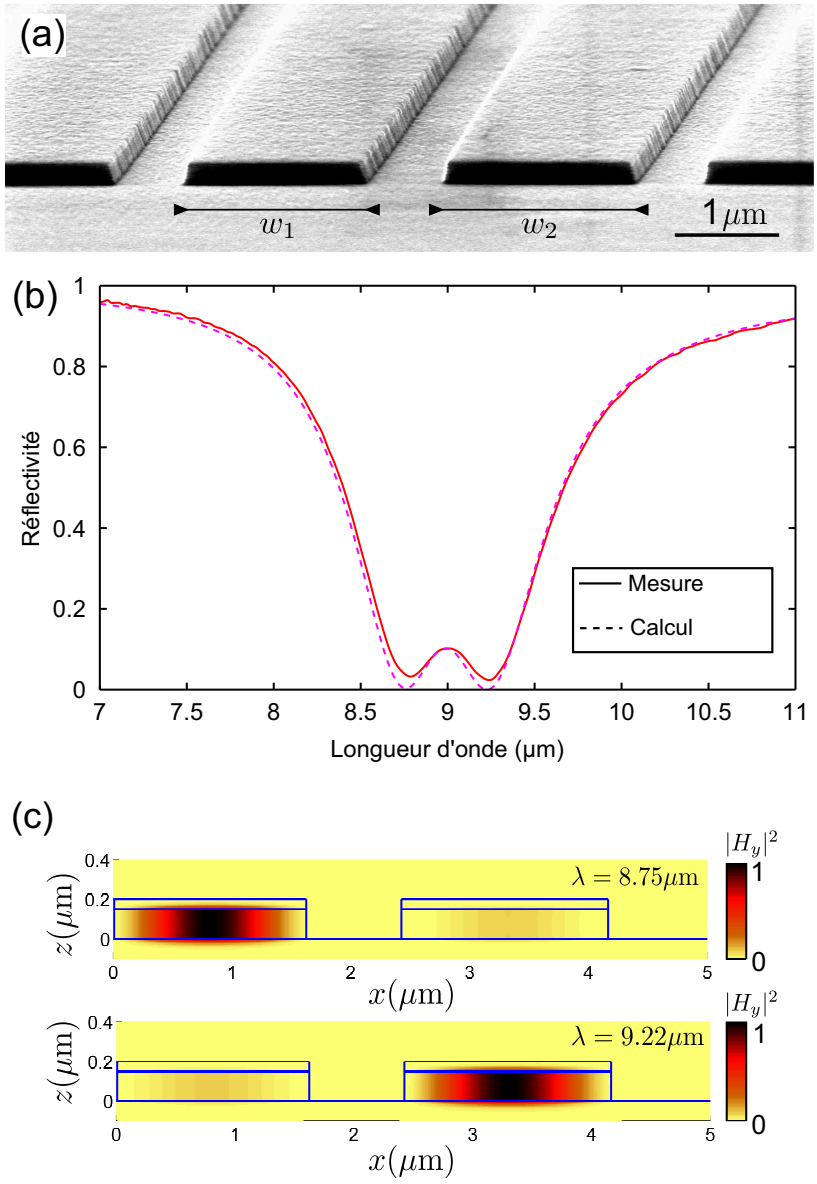

FIGURE 6.24 – (a) Image MEB de la structure biMIM ($w_1 = 1.62\mu$m et $w_2 = 1.74\mu$m)). (b) Courbes de réflectivité de la structure biMIM en polarisation TM avec un angle d'incidence de 13° mesurée (ligne pleine) et calculée (ligne pointillée). Il y a deux pics d'absorption aux longueurs d'onde $\lambda_r^1 = 8.75\mu$m et $\lambda_r^2 = 9.22\mu$m (c) Cartes d'intensité du champ magnétique de la structure biMIM aux deux pics d'absorption $\lambda_r^1 = 8.75\mu$m et $\lambda_r^2 = 9.22\mu$m. Le champ est concentré dans la structure MIM de largeur w_i à la longueur d'onde λ_r^i, ce qui traduit un tri de photons dans cette structure.

La figure 6.24a-b rappelle les résultats expérimentaux obtenus sur l'échantillon biMIM.

Dans la figure 6.24c, on trace la carte d'intensité du champ magnétique aux deux pics d'absorption $\lambda_r^1 = 8.75\mu$m et $\lambda_r^2 = 9.22\mu$m. Le champ est concentré dans la structure MIM de largeur w_i à la longueur d'onde λ_r^i, ce qui indique que les photons sont absorbés préférentiellement vers un des rubans dans cette structure.

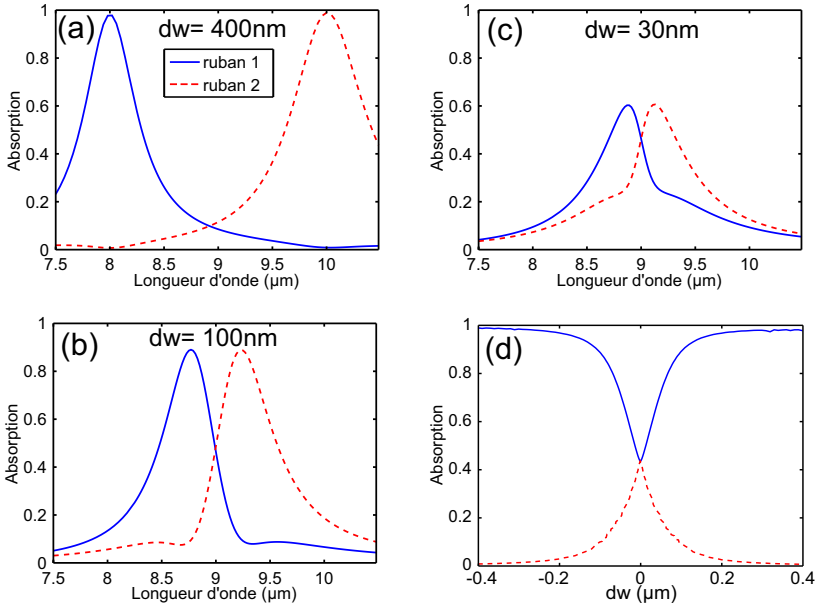

FIGURE 6.25 – Spectre d'absorption dans chacun des rubans du biMIM pour (a) dw = 400nm, (b) dw = 100nm et (c) dw = 30nm. (d) Évolution de l'absorption dans chacun des rubans MIM à la longueur d'onde du maximum d'absorption dans le premier ruban en fonction de dw.

Pour étudier plus en détail ce tri de photons et l'influence éventuelle du couplage entre résonateurs, on trace les spectres d'absorption des rubans du biMIM pour différentes valeurs de dw dans les figures 6.25a-c. Quand les résonateurs sont découplés, on observe un tri parfait (100%/0%) à la longueur d'onde de résonance λ_r^i (6.25a). L'efficacité du tri reste élevée même lorsqu'il y a un faible couplage entre résonateurs (90%/10% pour dw = 100nm, 6.25b). Cela signifie que des photons dont les longueurs d'onde sont séparées d'au moins 500nm peuvent être collectés et triés dans une structure biMIM. On peut imaginer faire une structure 9 résonateurs qui couvrirait toute la bande 8-12 μm. Par ailleurs, à la longueur d'onde de résonance d'un ruban, l'autre ruban non résonant présente un minimum local d'absorption, ce qui suggère que le ruban résonnant collecte plus efficacement les photons, assurant ainsi la robustesse du mécanisme de tri. La figure 6.25d montre l'évolution de l'absorption dans chacun des rubans à la longueur d'onde d'absorption maximale dans le premier ruban en fonction de dw. Lorsque les résonateurs sont couplés (*i.e.* dw < 100nm), l'efficacité du tri diminue pour atteindre comme attendu 50% pour dw = 0nm (voir la figure 6.25c pour le cas dw = 30nm).

La figure 6.26a représente, aux deux longueurs d'onde de résonance λ_r^i de la structure biMIM, l'absorption calculée dans chacun des rubans en fonction de l'angle d'incidence. Le

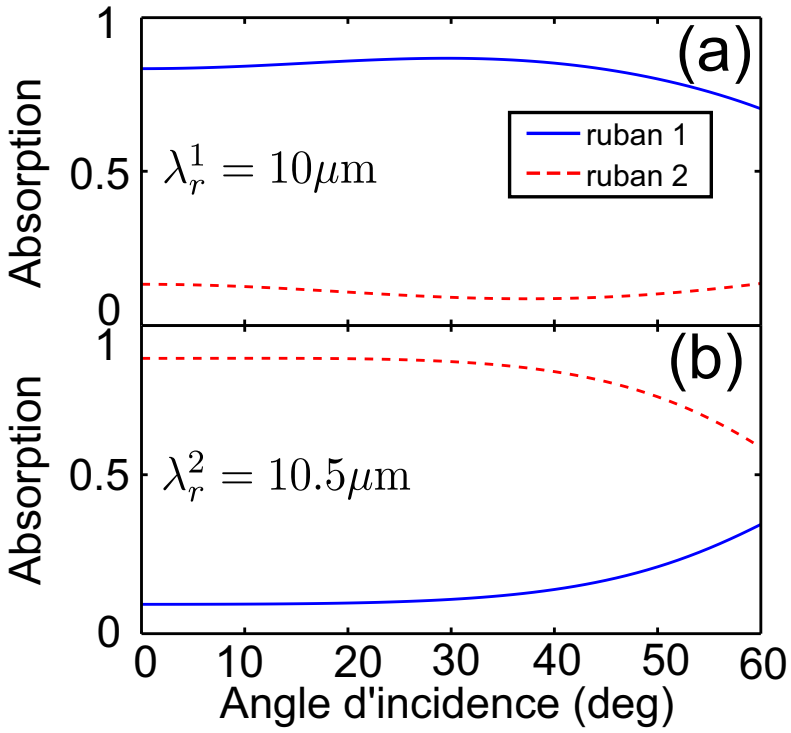

FIGURE 6.26 – Absorption dans chacun des rubans en fonction de l'angle d'incidence à (a) $\lambda_r^1 = 10\mu$m et (b) $\lambda_r^2 = 10.5\mu$m.

niveau d'absorption dans les deux rubans reste dans les deux cas constants jusqu'à 40°. En conséquence, cela assure l'indépendance angulaire de la collection quasi-totale et du tri de la lumière par la structure biMIM.

Pour conclure, on vient de démontrer expérimentalement la possibilité d'intégrer plusieurs MIM découplés dans une période, ce qui a pour effet d'élargir la bande d'absorption, chaque MIM continuant de résonner à sa fréquence avec une absorption quasi-totale. Par un dimensionnement adéquat, on peut régler la position des résonances en jouant uniquement sur la largeur des rubans, les épaisseurs des couches étant fixes. Par ailleurs, la réponse optique de ces structures ne dépend pas de l'angle d'incidence jusqu'à 40°, l'absorption diminuant légèrement pour des inclinaisons plus élevées, mais les longueurs d'onde de résonance restent constantes jusqu'à 70°. Enfin, les photons sont triés vers le résonateur à l'origine de la résonance.

6.4 Conclusion

Le couplage entre résonances dans des structures plasmoniques est un sujet foisonnant, où il reste maintes questions à explorer et qui promet de nombreuses applications. Ainsi, dans

le cas d'un réseau de sillons, il peut y avoir apparition d'un couplage fort entre les plasmons de surface et le mode localisé qui mène alors à deux états hybridés. Le premier état hybridé est caractérisé par une réflectivité spéculaire nulle, l'énergie incidente est réfléchie vers le premier ordre de diffraction du réseau tandis que le second état mène à une absorption totale à très grand facteur de qualité ($Q > 100$). J'ai également montré dans ce chapitre qu'il était possible de juxtaposer un grand nombre de résonateurs type sillon vus dans les chapitres précédent et ainsi d'élargir la bande d'absorption sans contrepartie. Par ailleurs, dans le cas de résonateurs indépendants comme des rubans MIM, il est possible de trier les photons incident dans l'un ou l'autre des rubans, ce qui est d'un intérêt fondamental pour des applications de détection multispectrale. Ce tri se fait au sein d'une période sub-longueur d'onde. Les dispositifs étudiés deviennent également plus complexes, même en restant invariant suivant une dimension. Il se pose alors le problème de l'optimisation de ces structures. On peut y répondre soit par des règles de dimensionnement, mais le comportement des couplages entre plusieurs résonateurs sillons n'est pas forcément intuitif, soit par des méthodes de calcul plus rapides. Je vais présenter dans la partie suivante les résultats de nos efforts sur ce sujet.

Troisième partie

Développement de méthodes numériques

Chapitre 7 Méthode modale B-spline

Sommaire

7.1 Méthode modale B-spline 98

7.1.1 Equation aux valeurs propres 98

7.1.2 Algorithme de matrices S 103

7.1.3 Convergence de BMM 104

7.2 Incidence conique 107

7.2.1 Equations de Maxwell en incidence conique 107

7.2.2 Formalisme de matrices S en incidence conique 109

7.2.3 Exemples numériques 109

7.3 Conclusion et perspectives 111

Pour prévoir les propriétés optiques de structures sub-longueur d'onde, et ainsi développer des nouveaux concepts et dimensionner les composants associés, il est nécessaire de disposer de codes de calcul efficaces. Plusieurs méthodes ont été développées[1], comme la méthode des éléments finis[2] ou encore la méthode FDTD (finite-difference time domain)[3], qui sont capables de traiter des cas généraux et sont implémentées dans des logiciels commerciaux comme Comsol ou HFSS. Cependant, dans le cas où on traite des structures qui peuvent être assimilées à un empilement fini de couches invariantes suivant une direction, les méthodes modales sont plus adaptées. En effet, la résolution des équations de Maxwell se fait dans chaque couche considérée comme semi-infinie, ce qui ne nécessite plus qu'un maillage 2D au lieu de 3D. La méthode modale la plus utilisée dans la communauté optique est certainement la méthode modale de Fourier, aussi appelée RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis)[4].

Dans ce chapitre, je décris la méthode modale B-spline (BMM) que j'ai développée pendant la première partie de ma thèse, et qui permet de modéliser des empilements de couches structurées suivant une dimension. Cette méthode résout les équations de Maxwell et les équations constitutives à l'aide d'une approximation des champs par des fonctions B-splines[5]. Une équation aux valeurs propres est écrite dans chaque couche du dispositif,

[1] Besbes et al., « Numerical analysis of a slit-groove diffraction problem ».

[2] Wei et al., « Finite-element model for three-dimensional optical scattering problems ».

[3] Taflove et al., « The finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interactions » ; Yee, « Numerical solution of inital boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media ».

[4] Lalanne et al., « Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization » ; Li et al., « Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings ».

[5] Schoenberg, « Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions.

en interpolant le champ électromagnétique sur un maillage non-uniforme par des B-splines. Cette méthode présente deux avantages par rapport à RCWA. Premièrement, le maillage non-uniforme peut être raffiné au niveau des sauts de permittivité. Par ailleurs, les matrices obtenues dans l'équation aux valeurs propres sont creuses du fait de cette interpolation B-splines, ce qui permet une résolution rapide[6].

7.1 Méthode modale B-spline

Le système étudié pour mettre en place les équations de Maxwell dans cette partie est celui de la figure 7.1. Les régions 1 et 3 sont semi-infinies et constituées d'un matériau homogène (*e.g.* de l'air ou le substrat). L'onde incidente sur le réseau est monochromatique de longueur d'onde λ, polarisée transverse magnétique (TM) et fait un angle θ avec l'axe vertical z. Nous choisissons pour l'onde incidente une dépendance temporelle $\exp(-i\omega t)$. Les résultats obtenus pour une onde polarisée transverse électrique (TE) seront également présentés. Ces travaux ont été décrits dans deux publications[7].

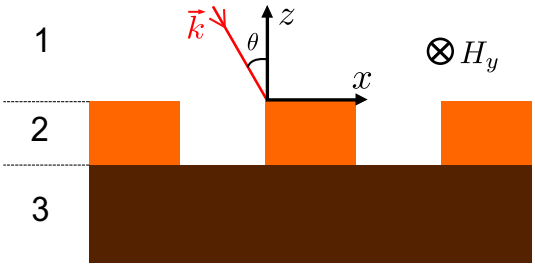

FIGURE 7.1 – Réseau 1D structuré suivant l'axe x et invariant suivant y dans la couche 2. Les régions 1 et 3 sont semi-infinies et constituées d'un matériau homogène (*e.g.* de l'air). L'onde incidente sur le réseau est monochromatique de longueur d'onde λ, polarisée transverse magnétique (TM) et fait un angle θ avec l'axe vertical z.

7.1.1 Equation aux valeurs propres

Dans BMM, l'équation aux valeurs propres est écrite dans chaque couche de la structure, y compris dans les régions homogènes semi-infinies supérieure et inférieure, là où d'autres méthodes modales préfèrent utiliser une décomposition de Rayleigh tronquée[8].

Part A: On the problem of smoothing or graduation. A first class of analytic approximation formulae. Part B: On the problem of osculatory interpolation. A second class of analytic approximation formulae. »

[6] LEHOUCQ et al., *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods* ; SAAD, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*

[7] BOUCHON et al., « Fast modal method for subwavelength gratings based on B-splines formulation » ; BOUCHON et al., « Simulations of nano-optics devices with a fast B-spline modal method ».

[8] LALANNE et al., « Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization ».

Equations de Maxwell et constitutives

Dans chaque couche, les champs électromagnétiques sont décrits par les équations de Maxwell :

$$\partial_t B + \nabla \times E = 0, \tag{7.1}$$

$$-\partial_t D + \nabla \times H = 0. \tag{7.2}$$

Nous cherchons les solutions de ces équations sous la forme de modes propres, chacun étant associé à la composante k_z de son vecteur d'onde.

Ainsi, le m-ème mode du champ magnétique va s'écrire dans une couche comme :

$$H_y = H_y^{(m)} \exp(ik_z^m z - i\omega t). \tag{7.3}$$

Ce qui permet de réécrire la projection des équations de Maxwell :

$$-i\omega B_y - \partial_x E_z + ik_z E_x = 0 \tag{7.4}$$

$$D_x = \frac{k_z}{\omega} H_y \tag{7.5}$$

$$D_z = \frac{i}{\omega} \partial_x H_y \tag{7.6}$$

Les paramètres physiques des matériaux n'apparaissent pas dans ces équations, mais sont introduits via les équations constitutives, où μ_0 et $\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2}$ désignent respectivement la perméabilité et la permittivité du vide :

$$B = \mu_0 \mu H \tag{7.7}$$

$$D = \epsilon_0 \epsilon E \tag{7.8}$$

La perméabilité μ et la permittivité ϵ sont généralement des tenseurs 3×3, mais nous nous limitons dans cette version de BMM à considérer des matériaux homogènes, donc décrits par des tenseurs diagonaux. Les matériaux qui nous intéressent sont isotropes, mais pour pouvoir utiliser des conditions aux limites de type PML (perfectly matched layers)[9], je considére des milieux anisotropes d'axes x, y et z.

En notant le vecteur d'onde incident dans le vide $k_0 = \omega c$, et le vecteur d'onde normalisé $k_{zN} = k_z/k_0$, nous pouvons réécrire les équations précédentes sous la forme :

[9] Berenger, « Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves ».

$$\mu_y H_y + \frac{1}{k_0^2}\partial_x(\frac{1}{\epsilon_z}\partial_x H_y) = k_{zN}^2 \frac{H_y}{\epsilon_x}. \tag{7.9}$$

Une équation similaire peut être obtenue pour une onde TE par simple permutation des composantes de ϵ et μ, et de H et E :

$$\epsilon_y E_y + \frac{1}{k_0^2}\partial_x(\frac{1}{\mu_z}\partial_x E_y) = k_{zN}^2 \frac{E_y}{\mu_x}. \tag{7.10}$$

Ces équations sont strictement exactes pour tout point (x_i, z_i) de l'espace. Toutefois, pour les résoudre numériquement, il faut utiliser une approximation du champ magnétique qui permet d'exprimer ses dérivées successives. Dans la suite, nous choisissons de faire une interpolation B-spline sur un maillage.

Interpolation B-splines

Les B-splines forment une base de fonctions définies par des polynômes par morceaux de même degré sur un maillage de nœuds $t_1 ... t_m$. Chaque B-spline est défini positif sur un segment, ce qui permet d'obtenir des matrices creuses lors d'une interpolation. On note N_i^p le B-spline de degré p commençant au nœud t_i, les B-splines sont récursivement définis par la formule de Cox et De Boor[10] :

$$N_i^0(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t \in [t_j \ t_{j+1}] \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \tag{7.11}$$

$$N_i^p(t) = \frac{t - t_j}{t_{j+n} - t_j} N_i^{p-1}(t) + \frac{t_{j+n+1} - t}{t_{j+n+1} - t_{j+1}} N_{i+1}^{p-1}(t). \tag{7.12}$$

Les B-splines sont donc complètement définis par le maillage choisi. La figure 7.2 montre des B-splines de degrés 0 à 4 construits par récurrence à partir des équations 7.11 et 7.12. Les B-splines et leurs dérivées sont continus, mais il est possible d'introduire des discontinuités en utilisant des nœuds dégénérés. Un exemple de cette propriété est donné sur la figure 7.2 qui représente un ensemble de B-splines de degré 2 sur un maillage incluant un nœud 2 fois dégénéré. Les dérivées des B-splines non nulles en ce point dégénéré sont donc discontinues.

L'interpolation B-spline du champ magnétique TM s'écrit :

$$H_y(x) = \sum_i N_i^p(x) P_i, \tag{7.13}$$

où les P_i sont appelés points de contrôle et sont les coefficients à déterminer dans la suite, tandis que la base de B-splines est intégralement définie par le maillage choisie.

[10] Cox, « The Numerical Evaluation of B-Splines* » ; De Boor, « On calculating with B-splines ».

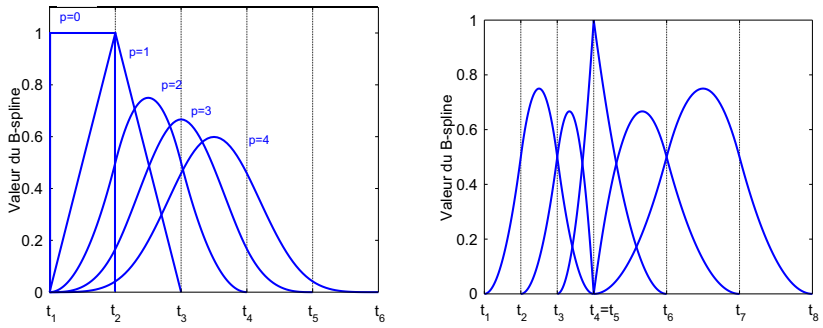

FIGURE 7.2 – A gauche, B-splines de degré 0 à 4 définis sur un maillage de nœuds $t_1 ... t_6$ uniforme. Un B-spline de degré p est défini sur un segment de $p+1$ nœuds et est nul ailleurs. A droite, B-splines de degré 2 sur un maillage incluant un nœud 2 fois dégénéré. Les dérivées des B-splines commençant aux nœuds t_2, t_3 et t_4 ne sont pas continues en t_4.

Conditions aux interfaces dans une couche de type réseau

Dans une couche structurée, à l'interface entre deux milieux (saut d'indice), les dérivées du champ électromagnétique sont discontinues, mais les champs tangentiels H_y et E_x restent eux continus. Pour imposer les conditions de discontinuité des dérivées de H_y, nous positionnons à l'interface, caractérisée par sa position x_{int} suivant l'axe x, un nœud p-dégénéré. Comme écrit dans l'équation 7.13, H_y est une somme de B-splines et est donc naturellement continu. Cependant, ce n'est pas le cas de la composante z du champ électrique et nous devons imposer une condition pour s'assurer de sa continuité à l'interface. A partir des équations 7.6 et 7.8, la continuité de E_z impose celle de $\partial_x H_y/\epsilon_z$ au point x_{int} et s'écrit donc, après interpolation (voir équation 7.13) :

$$\frac{\sum_i N_i^{'}(x_{\text{int}}^{+})P_i}{\epsilon_z(x_{\text{int}}^{+})} - \frac{\sum_i N_i^{'}(x_{\text{int}}^{-})P_i}{\epsilon_z(x_{\text{int}}^{-})} = 0, \tag{7.14}$$

où x_{int}^{-} et x_{int}^{+} désignent les valeurs limites des B-splines à gauche et à droite de l'interface. Si nous écrivons cette équation sur chaque interface de la couche considérée, nous obtenons une équation matricielle où chaque ligne de la matrice M_{cont} correspond à une interface. Si le maillage de la couche est de n_p nœuds et qu'il y a n_{int} sauts de permittivité ou interfaces, alors la matrice M_{cont} est de taille $(n_{\text{int}} \times n_p)$ et on a $M_{\text{cont}}P = 0$ où P est le vecteur des points de contrôle P_i. Résoudre cette équation revient à trouver le noyau de la matrice M_{cont}, dont les lignes sont linéairement indépendantes. Nous appelons Γ une matrice composée d'une base de ce noyau et définissons le vecteur Q comme

$$P = \Gamma Q. \tag{7.15}$$

Pour prendre en compte la continuité de E_z aux interfaces, nous introduisons donc la matrice rectangulaire Γ et le vecteur Q qui remplacent le vecteur P dans les équations.

Cette matrice Γ réduit le degré de liberté sur le vecteur P et nous aurons in fine besoin

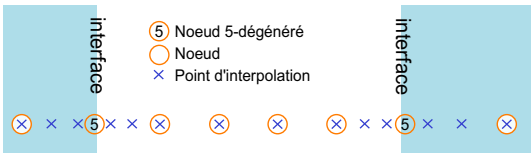

FIGURE 7.3 – Maillage de nœuds et points d'interpolation dans une couche structurée pour des B-splines de degré 5 (Le degré est toujours choisi impair pour qu'il n'y ait pas de points d'interpolation placé sur l'interface.) Un nœud 5-dégénéré est placé sur chaque interface et les 4 points d'interpolations sont répartis uniformément de chaque côté de l'interface entre les nœuds voisins. Dans les zones homogènes, les nœuds et points d'interpolation sont confondus et placés uniformément.

d'interpoler le champ sur seulement $n_p - n_{\text{int}}$ points. Autrement dit, dans une couche structurée, il y aura moins de points d'interpolation que de nœuds. Par ailleurs, le maillage de nœuds n'est pas uniforme puisqu'il y a p nœuds placés sur chaque interface. Il n'est donc pas possible de placer les points d'interpolation aux mêmes positions que les nœuds, en tout cas pour les nœuds placés sur une interface. Comme illustré en figure 7.3, nous plaçons donc $p-1$ points d'interpolation autour de l'interface, et en-dehors confondons les positions des nœuds et points d'interpolation qui sont espacés uniformément entre deux interfaces.

Equation généralisée aux valeurs propres

Grâce à l'interpolation B-splines, nous pouvons maintenant remplacer le champ H_y et ses dérivées dans l'équation 7.9 :

$$\mu_y \sum_i N_i P_i + \frac{1}{k_0^2}\frac{1}{\epsilon_z}\sum_i \partial_x^2 N_i P_i + \frac{1}{k_0^2}(\partial_x \frac{1}{\epsilon_z})\sum_i \partial_x N_i P_i = \frac{k_{zN}^2}{\epsilon_x}\sum_i N_i P_i \tag{7.16}$$

Nous écrivons cette équation sur chaque point d'interpolation ce qui conduit à l'équation matricielle suivante, dans laquelle nous introduisons la notation $[\![\ ]\!]$ pour désigner les matrices :

$$\left([\![\mu_y]\!][\![N]\!] + \frac{1}{k_0^2}[\![\frac{1}{\epsilon_z}]\!][\![\partial_x^2 N]\!] + \frac{1}{k_0^2}[\![\partial_x \frac{1}{\epsilon_z}]\!][\![\partial_x N]\!]\right)[\![P]\!] = k_{zN}^2 [\![\frac{1}{\epsilon_x}]\!][\![N]\!][\![P]\!]. \tag{7.17}$$

Les matrices $[\![N]\!]$ et $[\![\partial_x N]\!]$ sont creuses. En effet, sur une colonne se trouvent les valeurs des B-splines prises à chaque point d'interpolation. Comme un B-spline n'est défini non nul que sur un segment, seuls quelques uns de ces coefficients seront non nuls. De plus ces coefficients non nuls sont proches des diagonales des matrices, du fait du maillage choisi. Comme vu dans 7.1.1, il n'y a pas de points d'interpolation positionnés sur un saut de permittivité, autrement dit, ils sont tous dans un milieu homogène : le terme $\partial_x(1/\epsilon_z)$ est donc nul. En prenant en compte les conditions de continuité aux interfaces de l'équation 7.15, qui permettent de remplacer la matrice de vecteurs propres inconnus $[\![P]\!]$ par une

nouvelle matrice $[\![Q]\!]$ à l'aide de la matrice Γ on obtient :

$$\left([\![\mu_y]\!][\![N]\!] + \frac{1}{k_0^2}[\![\frac{1}{\epsilon_z}]\!][\![\partial_x^2 N]\!]\right)[\![\Gamma]\!][\![Q]\!] = k_{zN}^2[\![\frac{1}{\epsilon_x}]\!][\![N]\!][\![\Gamma]\!][\![Q]\!]. \tag{7.18}$$

C'est une équation généralisée aux valeurs propres où les matrices sont creuses, les coefficients étant non nuls sur $p+1$ diagonales autour de la diagonale centrale. En fixant des conditions aux limites périodiques $f(x+d) = \exp(ik_0 d \sin\theta)$, où d est la période de la couche de type réseau, on obtient des matrices finies avec quelques termes supplémentaires dans le coin haut supérieur. Cette équation peut être résolue avec des algorithmes classiques inclus dans LAPACK, et donne les $n_p - n_{\text{int}}$ vecteurs propres Q et valeurs propres associées k_{zN}^2. Pour résoudre un empilement de couches, on résout cette équation aux valeurs propres dans chaque couche, y compris dans les régions homogènes semi-infinies. Un algorithme de matrices S, décrit en détail dans la suite, est utilisé pour traiter l'empilement.

7.1.2 Algorithme de matrices S

Le principe de l'algorithme de matrices S est de relier les ondes arrivantes aux ondes sortantes sur une interface comme schématisé sur la figure 7.4. Il permet de décrire le comportement du champ électromagnétique à travers un empilement de couches[11].

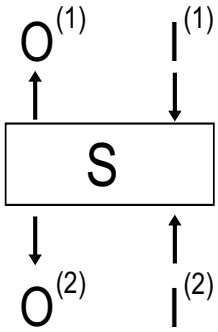

FIGURE 7.4 – Les matrices S relient les ondes entrantes (I) aux ondes sortantes (O).

Une fois que la matrice des vecteurs propres Q_i et la matrice diagonale K_i des valeurs propres k_z^2 ont été calculées dans la i-ème couche, nous pouvons écrire les matrices du champ électromagnétique :

$$H_{yi} = N\Gamma_i Q_i, \tag{7.19}$$

$$E_{xi} = \epsilon_{xi}^{-1} N\Gamma_i Q_i K_i, \tag{7.20}$$

où ϵ_i est une matrice diagonale, dont chaque coefficient correspond à la permittivité en un point d'interpolation. Pour alléger les notations dans la suite, H désignera la composante suivant y du champ magnétique et E la composante suivant x du champ électrique.

[11] LI, « Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings ».

Nous allons diviser la matrice S de l'interface entre les régions 1 et 2 en quatre sous-matrices S_{11}, S_{21}, S_{12} et S_{22}. La sous-matrice S_{11} (respectivement S_{21}) est définie comme la matrice des amplitudes modales réfléchies (respectivement transmises) pour une onde incidente depuis le milieu 1. Si on note V le vecteur d'amplitudes pour une onde incidente de la région 1, alors à l'interface entre les régions 1 et 2, le champ magnétique s'écrit H_1V. Les champs réfléchis et transmis sont respectivement $H_1S_{11}V$ et $H_2S_{21}V$. Si on écrit la continuité du champ tangentiel H_y à l'interface, on a :

$$H_1V + H_1S_{11}V = H_2S_{21}V. \tag{7.21}$$

Comme V est quelconque, l'équation (7.21) se généralise à :

$$H_1 + H_1S_{11} = H_2S_{21}. \tag{7.22}$$

De la même manière, la continuité du champ tangentiel E_y donne :

$$E_1 - E_1S_{11} = E_2S_{21}, \tag{7.23}$$

où le signe négatif vient du signe de k_z dans les équations (7.3) et (7.20).

Ces deux équations permettent d'obtenir les expressions des sous-matrices S_{11} et S_{21}

$$S_{11} = 1 - 2(1 + H_1^{-1}H_2E_2^{-1}E_1)^{-1}, \tag{7.24}$$

$$S_{21} = E_2^{-1}E_1(1 - S_{11}). \tag{7.25}$$

Des expressions similaires sont obtenues pour les deux sous-matrices S restantes S_{12} et S_{22}. Pour une structure réseau à trois couches comme celle décrite sur la figure 7.5, les sous-matrices S d'amplitudes réfléchies et transmises du réseau vont s'écrire :

$$S_{11}^{\text{réseau}} = S_{11}^{\alpha} + S_{12}^{\alpha}(1 - \Pi S_{22}^{\beta}\Pi S_{22}^{\alpha})^{-1}\Pi S_{22}^{\beta}\Pi S_{21}^{\alpha}, \tag{7.26}$$

$$S_{31}^{\text{réseau}} = S_{32}^{\beta}\Pi(1 - S_{22}^{\alpha}\Pi S_{22}^{\beta}\Pi),^{-1} S_{21}^{\alpha} \tag{7.27}$$

où l'on désigne par α et β les deux interfaces dans le réseau. La matrice Π correspond à la propagation des différents modes dans l'épaisseur du réseau. Ces deux formules peuvent être appliquées par récurrence à des empilements plus complexes.

7.1.3 Convergence de BMM

Calcul d'indice effectif

Dans la résolution modale d'un réseau métallique sub-longueur d'onde, les modes propagatifs vont jouer un rôle important dans la réponse optique de la structure. La précision de la

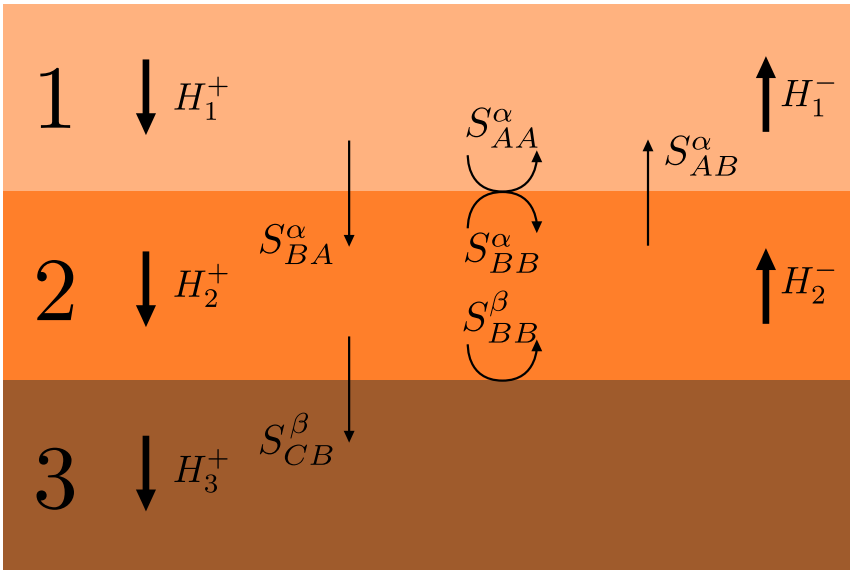

FIGURE 7.5 – Les sous-matrices S sont définies sur cette figure pour un empilement de 3 couches.

détermination des indices effectifs des modes propagatifs est donc un bon indicateur de la qualité de la méthode.

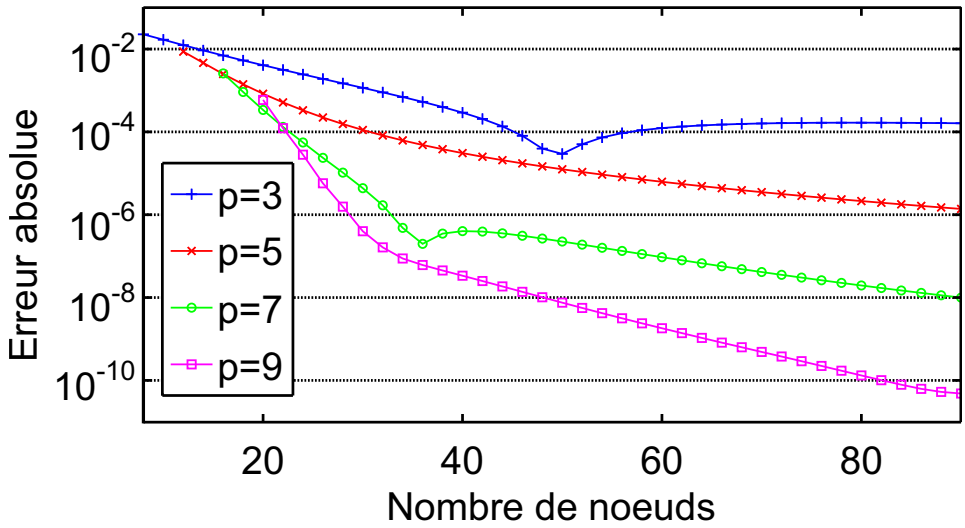

FIGURE 7.6 – Convergence de l'indice effectif du mode propagatif en fonction du nombre de nœud, dans un réseau d'argent ($d = 2w = 1\mu$m, $n = 0.22 + 6.71i$) illuminé par une onde TM à 1μm sous une incidence de 30° pour différents degrés de B-splines.

Nous étudions ici un exemple déjà étudié dans la littérature[12], il s'agit d'un réseau d'argent de période 1μm et de facteur de remplissage 50%. L'onde incidente est polarisée TM, à une longueur d'onde de 1μm et sous une incidence de 30°. A cette longueur d'onde, l'indice

[12] LALANNE et al., « Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization » ; LI et al., « Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings ».

de réfraction de l'argent est $n = 0.22 + 6.71i$. Pour ce système, un calcul analytique donne la valeur exacte de l'indice effectif $n_{\text{eff}}^{\text{exact}} = 1.0507 + 0.0018i$ du premier mode propagatif. Dans la figure 7.6, la différence $|n_{\text{eff}}^{\text{exact}} - n_{\text{eff}}^{\text{BMM}}|$ est tracée en fonction du nombre de nœuds utilisés pour mailler la structure. La convergence s'améliore logiquement lorsqu'on augmente le nombre de nœuds et le degré du B-spline, permettant d'atteindre des erreurs très faibles de l'ordre de 10^{-10}. Par ailleurs, des irrégularités dans la convergence sont visibles pour les B-splines de degré 3 et 7 qui s'expliquent par l'utilisation d'un maillage automatique pour positionner les nœuds à proximité des interfaces (voir figure 7.3). Ce maillage n'est certainement pas optimisé dans ce cas précis, mais a fait ses preuves dans de nombreuses situations.

Convergence en polarisation TM

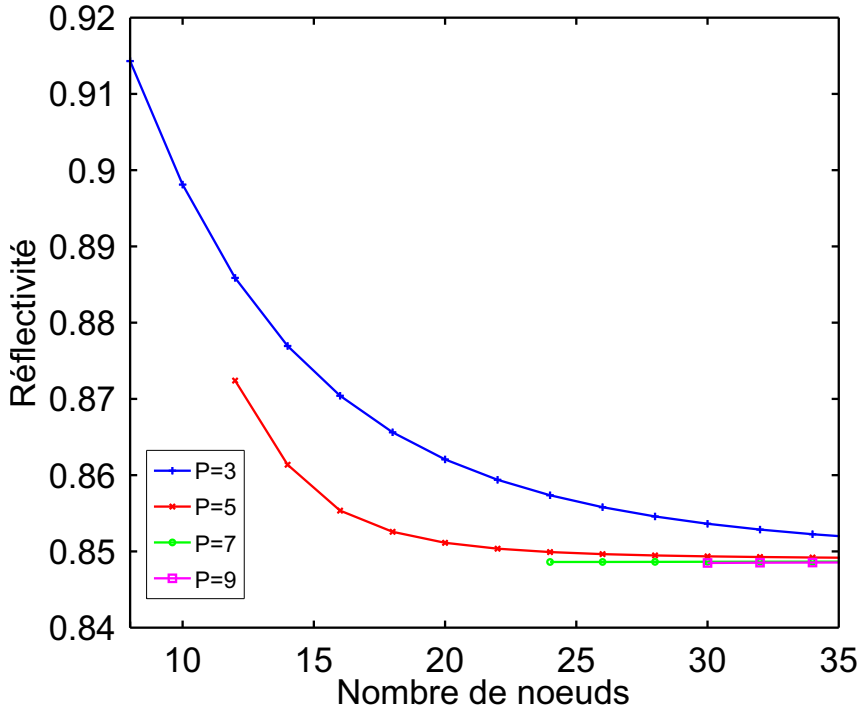

FIGURE 7.7 – Convergence de la réflectivité de l'ordre 0 en fonction du nombre de nœuds, dans un réseau d'argent ($d = 2w = 1\mu$m, $n = 0.22 + 6.71i$) illuminé par une onde TM à 1μm en incidence de 30° pour différents degrés de B-splines.

Nous reprenons en premier exemple la structure précédente, le réseau est non débouchant et a une profondeur de 1μm. On trace la convergence de la réflectivité de l'ordre 0 en fonction du nombre de nœuds et pour différents degrés de B-splines sur la figure 7.7. La valeur exacte est $R = 84.84\%$, et on obtient une excellente convergence avec BMM. L'erreur relative avec 120 nœuds est de 0.024% alors que par comparaison, avec RCWA, on obtient une

erreur de 0.1% en prenant 120 ordres[13]. Cette différence de convergence est en partie due à l'utilisation d'un maillage non-uniforme dans le cas de BMM qui permet de raffiner le calcul aux interfaces. Il faut néanmoins noter que la convergence de RCWA peut être améliorée en utilisant des transformations de coordonnées[14].

7.2 Incidence conique

7.2.1 Equations de Maxwell en incidence conique

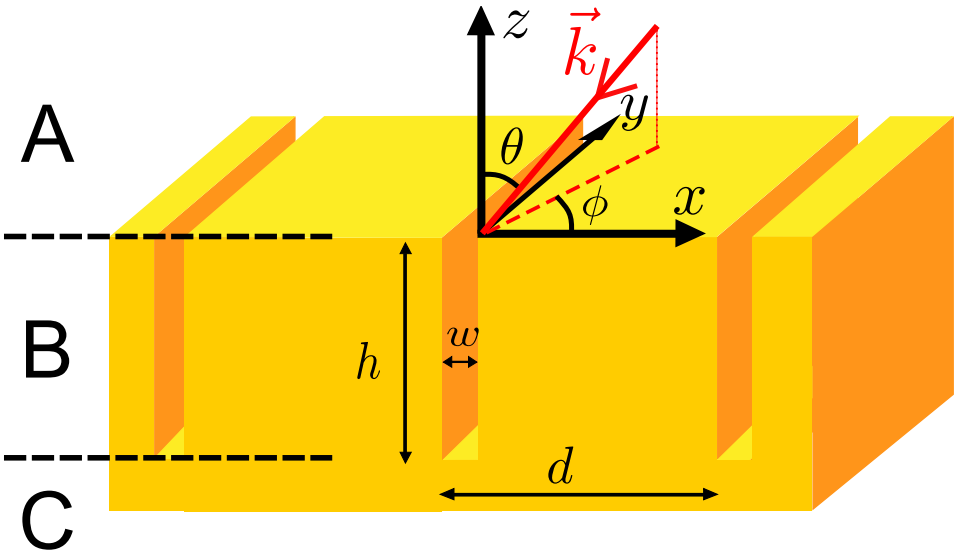

FIGURE 7.8 – Schéma de la structure en incidence oblique. On définit l'angle ϕ entre le plan d'incidence et le plan xz, tandis que θ reste l'angle entre le vecteur $\vec{k}$ et l'axe z. La structure peut être décomposée en trois régions, B étant toujours la couche réseau et les régions A et C sont des milieux homogènes semi-infinis.

Dans cette partie, nous décrivons les modifications qui apparaissent dans la méthode lorsqu'on se place en incidence conique comme décrit sur la figure 7.8. Pour simplifier, nous nous plaçons dans la situation où $\phi = 90°$ et où θ varie. La structure est décrite sur la figure 7.8, elle peut être décomposée en 3 régions, les régions A et C sont des milieux homogènes semi-infinis. La couche B est le réseau de période d, d'épaisseur h et de largeur de fente w. Les matériaux considérés sont non magnétiques $\mu = 1$ et caractérisés par leur permittivité ϵ qui, comme les matériaux sont homogènes, est diagonale. Bien qu'ils soient également isotropes, on gardera la distinction entre les différentes composantes pour pouvoir traiter ultérieurement les motifs apériodiques grâce à des conditions PML. L'onde incidente arrive sur la structure dans le plan Oyz avec l'angle θ par rapport à l'axe Oz et est en polarisation TE.

[13] LALANNE et al., « Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization ».
[14] GRANET, « Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution ».

Dans la couche réseau, on va écrire une décomposition modale du champ magnétique. En prenant en compte l'invariance suivant y de la couche réseau, l'incidence et la dépendance en $-i\omega t$, le n-ème mode du champ magnétique s'écrit :

$$H_x = 0 \tag{7.28}$$

$$H_y(x,y,z) = H_y^n(x)\exp(ik_z^n + ik_y y - i\omega t) \tag{7.29}$$

$$H_z(x,y,z) = H_z^n(x)\exp(ik_z^n + ik_y y - i\omega t). \tag{7.30}$$

D'après l'équation de Maxwell $\nabla \mathrm{B} = 0$ et l'équation constitutive $\mathrm{B} = \mu \mathrm{H}$, on obtient :

$$H_z^n = \frac{-k_y}{k_z^n} H_y^n \tag{7.31}$$

Dans la suite, on fera toujours référence au n-ème mode sans le préciser.

Par l'équation de Maxwell-Ampère projetée sur l'axe y, on a :

$$-i\omega B_y - \partial_x E_z + ik_z E_x = 0 \tag{7.32}$$

On va remplacer dans cette équation les différents champs par H_y. On a par l'équation constitutive $B_y = \mu_y H_y$ et l'équation de Maxwell-Faraday projetée sur les axes x et z donne :

$$D_x = \frac{k_y^2 + k_z^2}{\omega k_z} H_y \tag{7.33}$$

$$D_z = \frac{i}{\omega}\partial_x H_y \tag{7.34}$$

Avec l'équation constitutive $\mathrm{E} = \epsilon \mathrm{D}$, on peut désormais réécrire l'équation 7.32 :

$$\mu_y H_y + \frac{1}{k_0^2}\partial_x\left(\frac{1}{\epsilon_z}\partial_x H_y\right) = \left(\frac{k_y^2 + k_z^2}{k_0^2}\right)\frac{H_y}{\epsilon_x} \tag{7.35}$$

On fait ensuite l'approximation B-splines déjà présentée dans le cas 1D $H_y = \sum_i N_i(x)P_i$ et on prend en compte les conditions à une interface dans la couche de la même manière, en introduisant la matrice Γ. L'équation aux valeurs propres généralisée s'écrit :

$$\left(\llbracket \mu_y \rrbracket \llbracket N \rrbracket + \frac{1}{k_0^2}\llbracket \frac{1}{\epsilon_z} \rrbracket \llbracket \partial_x^2 N \rrbracket\right) \llbracket \Gamma \rrbracket \llbracket Q \rrbracket = \left(\frac{k_y^2}{k_0^2} + k_{zN}^2\right) \llbracket \frac{1}{\epsilon_x} \llbracket N \rrbracket \rrbracket \llbracket \Gamma \rrbracket \llbracket Q \rrbracket \tag{7.36}$$

où N représente la matrice de valeurs des B-splines sur les points d'interpolation et Q les vecteurs propres. Cette équation aux valeurs propres est très proche de celle obtenue dans le cas non conique, l'unique différence étant l'expression de la valeur propre k_z^2 qui est remplacée par $k_z^2 + k_y^2$. Du point de vue du réseau, l'onde incidente même si elle est par définition TE va exciter principalement des modes TM, mais également des modes TE. Il faut donc prendre

en compte tous ces modes dans l'écriture des équations de continuité et résoudre également l'équation aux valeurs propres dans le cas TM qui s'obtient d'une manière équivalente :

$$\left(\llbracket\epsilon_y\rrbracket\llbracket N\rrbracket + \frac{1}{k_0^2}\llbracket\frac{1}{\mu_z}\rrbracket\llbracket\partial_x^2 N\rrbracket\right)\llbracket\Gamma\rrbracket\llbracket Q\rrbracket = \left(\frac{k_y^2}{k_0^2} + k_{zN}^2\right)\llbracket\frac{1}{\mu_x}\llbracket N\rrbracket\rrbracket\llbracket\Gamma\rrbracket\llbracket Q\rrbracket \tag{7.37}$$

7.2.2 Formalisme de matrices S en incidence conique

Nous présentons dans cette partie l'expression des termes de la matrice S pour l'interface 1-2 dans le cas où l'onde incidente est TE avec une amplitude notée U_e^1 projetée sur la base H_e^1 des vecteurs propres en TE dans la région 1. Il va y avoir une onde réfléchie dans chaque polarisation, en TE on la notera $H_e^1 S_{ee}^{11} U_e^1$ et en TM $H_m^1 S_{me}^{11} U_e^1$. On aura également une onde transmise dans chaque polarisation : $H_e^2 S_{ee}^{21} U_e^1$ et $H_m^2 S_{me}^{21} U_e^1$.

Pour cette écriture, la notation choisie pour les matrices S est de mettre en indice la polarisation dans laquelle on va puis celle d'où on vient, et en exposant le milieu vers lequel on va puis celui d'où on vient. Ainsi S_{me}^{11} signifie qu'on va du milieu 1 au milieu 1 (réflexion) et de la polarisation TE à la polarisation TM.

On écrit à l'interface 1-2 la continuité tangentielle du champ électromagnétique (H_x, H_y, E_x, E_y), qui nous donne un système de quatre équations à résoudre :

$$H_{xe}^1 S_{em}^{11} + H_{xe}^2 S_{em}^{21} = 0 \tag{7.38}$$

$$H_{ym}^1 S_{mm}^{11} + H_{ym} - H_{ye}^1 S_{em}^{11} = H_{ym}^2 S_{mm}^{21} + H_{ye}^2 S_{em}^{21} \tag{7.39}$$

$$E_{xm}^1 - E_{xm}^1 S_{mm}^{11} = E_{xm}^2 S_{mm}^{21} \tag{7.40}$$

$$-E_{ym}^1 S_{mm}^{11} + E_{ye}^1 S_{em}^{11} = E_{ym}^2 S_{mm}^{21} + E_{ye}^2 S_{em}^{21}. \tag{7.41}$$

Pour obtenir l'expression des 4 termes de la matrices S pour l'interface 1-2, il reste à faire une inversion de matrice. Les expressions des termes $S_{11}^{\text{réseau}}$ et $S_{31}^{\text{réseau}}$ obtenues dans le cas non conique restent valables.

7.2.3 Exemples numériques

Dans cette partie, nous comparons le comportement de réseaux métalliques 1D suivant que l'incidence est parallèle aux fentes ou perpendiculaire (la polarisation étant choisie pour exciter le mode propagatif TM dans la fente). Nous étudions en particulier le cas de réseaux de fentes débouchantes en transmission (étudiée lors de la thèse de Grégory Vincent) et de réseaux de sillons en réflexion (voir chapitres 3 et 5).

Notre premier exemple est celui des réseaux de ponts métalliques suspendus sub-longueur d'onde qui présentent des résonances de transmission. Ces structures ont été décrites pour la

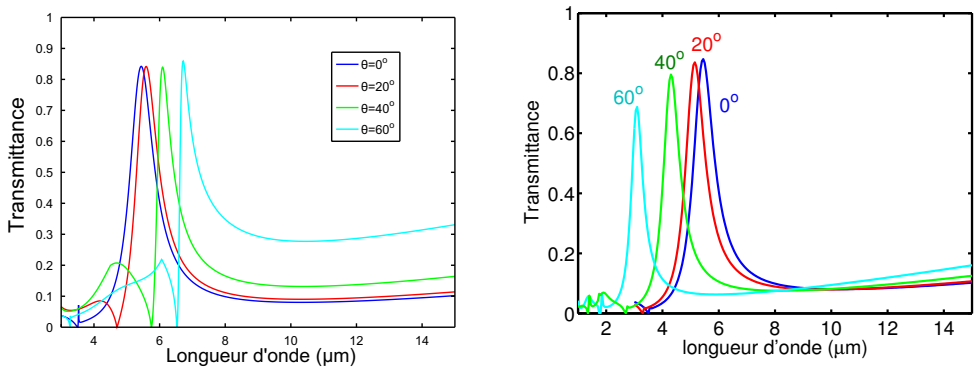

FIGURE 7.9 – Spectres de transmission d'un réseau suspendu dont les paramètres sont : $h = 2\mu$m, $d = 3.5\mu$m and $w = 0.5\mu$m. L'onde incidente est telle que le champ H est dans le plan Oyz et arrive avec un angle θ par rapport à Oz (a) avec $\phi = 0^o$ en polarisation TM et (b) avec $\phi = 90^o$ en polarisation TE.

première fois en 1999[15] avant que la démonstration expérimentale soit faite par une équipe LPN-CNRS/ONERA[16]. Les réseaux suspendus sont en or, la permittivité de ce métal est donnée par un modèle de Drude[17] : $\epsilon_{Au} = 1 - \omega_p^2/(\omega^2 + i\omega\gamma)$ avec $\omega_p = 1.18 \times 10^{16} s^{-1}$ et $\gamma = 0.91 \times 10^{14} s^{-1}$ La figure 7.9 présente les spectres de réflexion d'un réseau en or suspendu de période $d = 3.5\mu$m, les barreaux métalliques faisant 3μm de large et 2μm d'épaisseur. Dans la figure 7.9a, le réseau est dans le cas où $\phi = 0°$ et la polarisation est TM. Les spectres pour 4 angles d'incidence sont tracés et le pic de résonance se décale vers les longueurs d'ondes plus élevées lorsque l'incidence augmente. Dans la figure 7.9b, l'incidence se fait suivant le plan des fentes en polarisation TE. Le champ magnétique reste dans le plan Oyz et continue d'exciter le mode propagatif TM dans les fentes. On observe toujours une résonance qui permet une transmission extraordinaire de la lumière, mais cette fois-ci, lorsque l'incidence augmente, la résonance est décalée vers les basses longueurs d'onde.

Le deuxième exemple reprend le cas des réseaux étudiés dans les chapitres 3 et 5. Le réseau de sillons étudié a une période de $d = 2.5\mu$m et les sillons font 73nm de largeur et 935nm de profondeur. Le modèle de Drude utilisé pour le calcul est : $\epsilon_{Au} = 1 - \omega_p^2/(\omega^2 + i\omega\gamma)$ avec $\omega_p = 1.18 \times 10^{16} s^{-1}$ et $\gamma = 1.36 \times 10^{14} s^{-1}$. Les spectres de réflectivité pour différentes incidences sont présentés dans la figure 7.10 (a) pour $\phi = 0°$ et une polarisation TM et (b) pour $\phi = 90°$ et une polarisation TE. Dans le premier cas, la résonance ne dépend pas de l'angle d'incidence alors qu'elle est déplacée vers les petites longueurs d'onde dans le second cas, en suivant une loi de Snell-Descartes dans le sillon (voir chapitre 5).

[15] PORTO et al., « Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits ».
[16] COLLIN et al., « Nearly Perfect Fano Transmission Resonances through Nanoslits Drilled in a Metallic Membrane » ; VINCENT et al., « Large-area dielectric and metallic freestanding gratings for midinfrared optical filtering applications ».
[17] PALIK et al., *Handbook of optical constants of solids.*

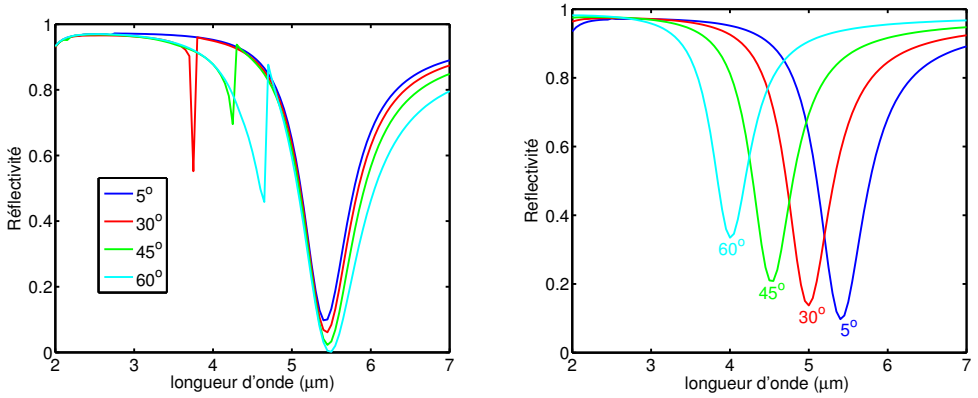

FIGURE 7.10 – Spectres de réflexion pour le réseau de fentes métalliques de période $d = 2.5\mu$m, largeur de fente $w = 73$nm et profondeur de fente $h = 935$nm. La polarisation de l'onde incidente est telle que le champ H est dans le plan Oyz et excite le mode propagatif TM dans le sillon. L'onde arrive avec un angle θ par rapport à Oz. (a) $\phi = 0^o$ et polarisation TM (b) $\phi = 90^o$ et polarisation TE.

7.3 Conclusion et perspectives

Nous avons décrit dans ce chapitre le principe de fonctionnement de la méthode modale B-spline pour des empilements de couches structurées suivant une dimension. Dans la limite de structures 1D, ce code peut être adapté à d'autres cas :

- structure apériodique

- structure présentant des variations continues de la permittivité

- matériaux ferromagnétiques

- matériaux non-linéaires

Par ailleurs, l'adaptation de ce code à des structures 2D (par exemple avec un maillage rectangulaire) est une autre perspective importante de ce code, d'autant plus avec les possibilités d'accélération du calcul grâce aux matrices creuses que nous décrivons dans le chapitre suivant.

Chapitre 8 Accélération des calculs avec les matrices creuses

Sommaire

8.1 Calculs accélérés de valeurs propres 114

8.1.1 Problème général et techniques de résolution 114

8.1.2 Approximation du problème général 116

8.1.3 Exemples numériques 117

8.2 Algorithme de matrices S réduit 119

8.2.1 Principe de l'algorithme réduit 119

8.2.2 Applications 120

8.3 Conclusion 122

Les matrices creuses obtenues dans les équations aux valeurs propres 7.18 vont permettre d'accélérer les calculs de valeurs et vecteurs propres. Des matrices creuses apparaissent dans de nombreuses situations. Le cas le plus connu est le *pagerank* de google[1], où les valeurs propres de la matrice sont calculées par la méthode itérative des puissances. Elles présentent à la fois des avantages par rapport au matrices pleines en terme de stockage, mais aussi pour des opérations élémentaires comme les additions ou multiplications de matrices qui sont grandement accélérées. Mais le point le plus intéressant dans notre cas est la possibilité d'accélérer la résolution d'équations aux valeurs propres. D'autres méthodes comme la méthode des différences finies ou la méthode des éléments finis manipulent également des matrices creuses[2], mais elles n'ont pas une aussi bonne précision de calcul. La méthode modale la plus populaire, RCWA, manipule quant à elle des matrices pleines, qui rendent impossible une accélération des calculs via l'utilisation d'algorithmes de résolution d'équations aux valeurs propres avec des matrices creuses. Dans ce chapitre, sont décrites en premier lieu les techniques de résolution des équations aux valeurs propres obtenues dans la méthode B-spline. Les algorithmes exploitant les matrices creuses permettent de résoudre l'équation pour un petit nombre de valeurs propres. Il faut donc également modifier l'algorithme de matrices S pour ne prendre en compte que ces modes calculés. L'adaptation de cet algorithme à un problème réduit est détaillée dans la deuxième partie de ce chapitre.

[1] Brin et al., « The anatomy of a large-scale hypertextual Web search engine* 1 » ; Langville et al., *Google page rank and beyond*.

[2] Brongersma et al., *Surface plasmon nanophotonics* ; Lalanne et al., « Numerical performance of finite-difference modal methods for the electromagnetic analysis of one-dimensional lamellar gratings » ; Veronis et al., « Method for sensitivity analysis of photonic crystal devices ».

8.1 Calculs accélérés de valeurs propres

8.1.1 Problème général et techniques de résolution

Résolution d'une équation aux valeurs propres à matrices creuses

Lors de la résolution des équations de Maxwell dans une couche considérée comme infinie suivant z, on est amené à résoudre une équation généralisée aux valeurs propres de type $AQ = BQK$ où A et B sont des matrices creuses obtenues à partir d'interpolation B-splines, Q est la matrice des vecteurs propres et K est la matrice diagonale des valeurs propres. La structure type des matrices A et B est présentée dans la figure 8.1, pour une base de B-splines de degré 5 et un maillage de 1000 nœuds. Si on avait pris en compte la périodicité, cela aurait imposé la présence de quelques termes non nuls dans le coin supérieur droit qui auraient eu peu d'incidence sur la densité de la matrice.

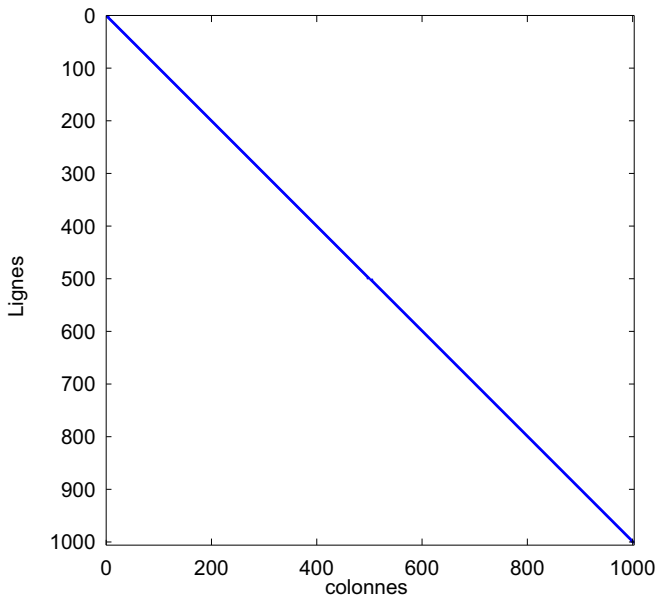

FIGURE 8.1 – Densité de la matrice de B-splines pour un degré 5 et un maillage de 1000 nœuds. La périodicité n'est pas prise en compte ici, mais ne modifie que faiblement la densité de la matrice.

Il existe plusieurs méthodes pour résoudre une équation aux valeurs propres, mais le fait que l'équation soit généralisée et que les matrices soient non hermitiennes limite le nombre de techniques utilisables. Dans notre cas, nous utiliserons la méthode d'Arnoldi implicitement redémarrée qui a été implémentée dans la bibliothèque ARPACK[3], elle-même utilisable dans MatLAB avec la fonction *eigs*. Dans la suite, le principe de la méthode d'Arnoldi est

[3] LEHOUCQ et al., *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods.*

détaillé.[4].

Méthode d'Arnoldi implicitement redémarrée

La méthode la plus courante pour trouver la valeur propre maximale et le vecteur propre associé d'une matrice A est l'itération de puissance[5]. L'algorithme commence par le choix d'un vecteur aléatoire v_0 et construit ensuite les vecteurs v_k par l'itération suivante :

$$v_{k+1} = \frac{Av_k}{\|Av_k\|}. \tag{8.1}$$

Si la matrice A a bien une valeur propre plus grande que les autres et que le vecteur v_0 a une composante non-nulle dans la direction d'un des vecteurs propres associés à la valeur propre maximale, alors la suite des vecteurs v_k va converger vers un des vecteurs propres associés à la valeur propre maximale donnée par la suite $\lambda_k = \frac{v_k^* A v_k}{v_k^* v_k}$. Cette méthode a une convergence géométrique avec comme ratio le rapport des deux plus grandes valeurs propres de la matrice A. Elle peut donc avoir une très faible convergence dans les cas les moins favorables. Par ailleurs, le fait de ne trouver qu'une seule valeur propre est une limite évidente, bien que ce soit cette méthode qui soit utilisée pour calculer le *pagerank* par google[6]. Dans la suite, nous allons introduire les techniques faisant appel aux sous-espaces de Krylov, générés à partir de la succession des vecteurs v_k calculés, et non seulement du dernier[7].

Les sous-espaces de Krylov sont la base des techniques les plus efficaces de résolution des équations aux valeurs propres à matrices creuses, en particulier les algorithmes de Lanczos et les méthodes d'Arnoldi[8]. Le sous-espace de Krylov K_m, défini par le vecteur v et la matrice A, est généré par la famille de vecteurs $(v, Av, A^2v, ..., A^{m-1}v)$. On voit donc que les différents éléments de la famille qui génère le sous-espace de Krylov K_m peuvent être construits en suivant l'équation 8.1 utilisée dans la méthode par itération de puissance. Cependant, on n'obtiendra pas directement une base orthogonale qui serait une bonne approximation des vecteurs propres de la matrice A.

Dans la méthode d'Arnoldi, on va construire les vecteurs (q_k) de telle sorte que la famille de vecteurs $(q_0 q_1 ... q_{m-1})$ forme une base orthonormée du sous-espace de Krylov K_m. La méthode d'Arnoldi utilise la technique de Gram-Schmidt pour obtenir cette orthogonalisation. Enfin, les valeurs propres vont être obtenues en trouvant les valeurs propres de la matrice de Hessenberg H_m correspondant à la projection de la matrice A sur le sous-espace de Krylov K_m. Comme la matrice H_m est d'une dimension bien inférieure à la matrice A, autrement dit $m \ll n$ où n est le rang de la matrice A, il suffit d'utiliser une méthode classique pour trouver ses valeurs propres, par exemple par la méthode QR[9]. Du point de vue du nombre d'opérations, la construction du k-ème vecteur q va demander $4kn + 2N_{creux}$ opérations

[4] Bai, *Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems* ; Quarteroni et al., *Numerical mathematics* ; Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*
[5] Quarteroni et al., *Numerical mathematics* ; Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*
[6] Langville et al., *Google page rank and beyond.*
[7] Quarteroni et al., *Numerical mathematics* ; Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*
[8] Quarteroni et al., *Numerical mathematics* ; Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*
[9] Quarteroni et al., *Numerical mathematics* ; Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems.*

où N_{creux} est le nombre d'éléments non nuls dans la matrice A. L'algorithme devient aussi rapidement gourmand en mémoire utilisée, stockant à la fois les m vecteurs v calculés et la matrice de Hessenberg de dimension $m \times m$, soit au total $nm + m^2/2$. Il faut noter que si la méthode d'Arnoldi va permettre de trouver plusieurs valeurs propres à la fois, il n'est pas rentable d'en calculer un très grand nombre.

Pour diminuer le nombre d'opérations de calcul et la quantité de mémoire allouée à la méthode d'Arnoldi, des méthodes utilisent des procédures de redémarrage. C'est le cas dans l'implémentation ARPACK, où l'algorithme d'Arnoldi va être implicitement redémarré après un certain nombre d'itérations.

8.1.2 Approximation du problème général

Il existe plusieurs méthodes de résolutions d'équations aux valeurs propres avec des matrices creuses, dont les plus intéressantes pour la résolution d'une équation généralisée où les matrices n'ont pas de propriétés intéressantes (positive ou hermitienne) viennent d'être présentées.

Nous devons donc résoudre un système du type $AQ = BQK$ où Q est la matrice des vecteurs propres, K est la matrice diagonale des valeurs propres et A et B sont les matrices obtenues en écrivant les équations de Maxwell sur la base de B-splines et en prenant en compte les conditions de continuité aux interfaces dans une couche. Les matrices A et B sont très peu denses et vont permettre d'accélérer le calcul d'un petit (devant la taille du système) nombre de valeurs propres. La méthode d'Arnoldi implicitement redémarrée ne permet cependant pas de résoudre des équations généralisées lorsque la matrice B n'est pas hermitienne[10]. Nous avons donc choisi de faire une approximation en nous ramenant à un problème aux valeurs propres sous la forme classique $B^{-1}AQ = QK$. Nous devons donc inverser la matrice B et dans la plupart des cas, l'inverse d'une matrice creuse est dense. La matrice B a une structure assez particulière, avec les termes non nuls majoritairement concentrés sur les diagonales principales. En étudiant son inverse, on se rend compte que la plupart des coefficients obtenus sont très faibles et nous faisons l'approximation qu'ils peuvent être mis à zéro. Une première technique d'approximation consiste à mettre à zéro les coefficients les plus faibles des matrices obtenus lors de la décomposition LU de B. On a $B = RP^{-1}LUQ^{-1}$, où les matrices L et U sont triangulaires respectivement inférieure et supérieure. Les matrices P et Q sont des matrices de permutation et la matrice S est une matrice diagonale de normalisation. La procédure d'approximation consiste donc à mettre à zéro tous les coefficients de QU^{-1} et $L^{-1}P$ qui sont en valeur absolue inférieurs au critère d'arrondi r. Une alternative d'efficacité similaire consiste à appliquer l'opération d'arrondi directement sur les coefficients de la matrice $B^{-1}A$.

[10] Lehoucq et al., *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods.*

8.1.3 Exemples numériques

Calcul du premier mode dans un réseau d'argent

Pour étudier l'effet de la procédure de nettoyage de l'inverse de la matrice B, nous allons étudier l'erreur sur le premier mode calculé dans un réseau d'argent en fonction du critère d'arrondi r. Le système, déjà présenté dans le chapitre 7, consiste en un réseau d'argent ($n = 0.22 + 6.71i$) de période $d = 1\mu$m et de taux de remplissage un demi sur lequel arrive une onde monochromatique $\lambda = 1\mu$m, polarisée TM et incidente avec un angle de 30°. La résolution d'équations aux valeurs propres avec des matrices creuses devient intéressante lorsque les matrices manipulées sont de très grandes tailles. Pour satisfaire ce type de conditions, nous utilisons un maillage de 1000 nœuds, bien plus dense que nécessaire pour résoudre le problème.

La densité de la matrice B^{-1} après approximation est tracée dans la figure 8.2 en fonction du critère d'arrondi. Après arrondi, la matrice est effectivement redevenue creuse avec une densité inférieure à 10%. Par ailleurs, l'erreur relative sur le premier mode propagatif dans le réseau est également tracée en fonction de l'arrondi choisi. Comme attendu, l'erreur augmente lorsqu'on arrondit avec un critère de plus en plus grand, mais l'erreur peut aussi atteindre des niveaux très faibles. En pratique, nous choisirons de préférence un critère d'arrondi valant $r = 10^{-8}$, correspondant à une erreur inférieure à 10^{-5}.

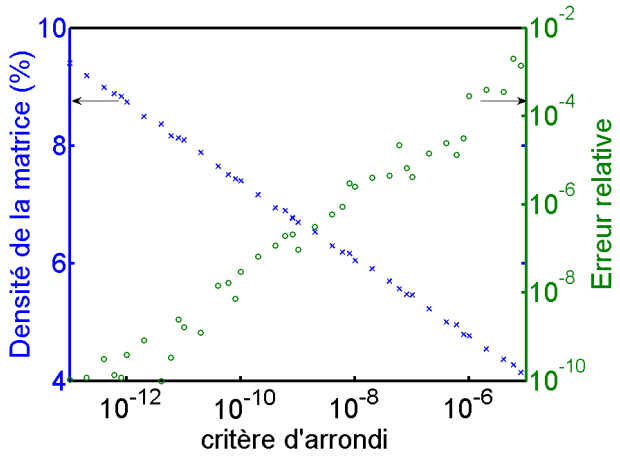

FIGURE 8.2 – Densité de la matrice B^{-1} et erreur sur le premier mode propagatif en fonction du critère d'arrondi choisi. La matrice B est calculée dans le cas de la résolution des équations de Maxwell dans la couche réseau d'argent. Le maillage est ici fixé à 1000 nœuds.

Calcul d'indice effectif dans un réseau à motif complexe

Dans ce deuxième exemple, nous mettons en lumière l'intérêt des matrices creuses d'un point de vue temps de calcul. Pour ce faire, nous étudions une couche réseau à motif complexe

dont un exemple est donné en figure 8.3 et qui a été préalablement étudié[11]. Il s'agit d'un réseau où il y a de une à cinq fentes de géométries identiques (largeur $a = 0.08\mu$m, hauteur $h = 1\mu$m) et espacées les unes des autres de $c = 0.08\mu$m. La période du réseau est $d = 1\mu$m et l'indice de réfraction du métal est $n = 0.15 + 24.9i$. Le spectre de transmission est tracé dans le cas du réseau à 3 fentes, les pics très fins dans le spectre sont liés à des résonances de phase entre les différentes fentes d'une même période.

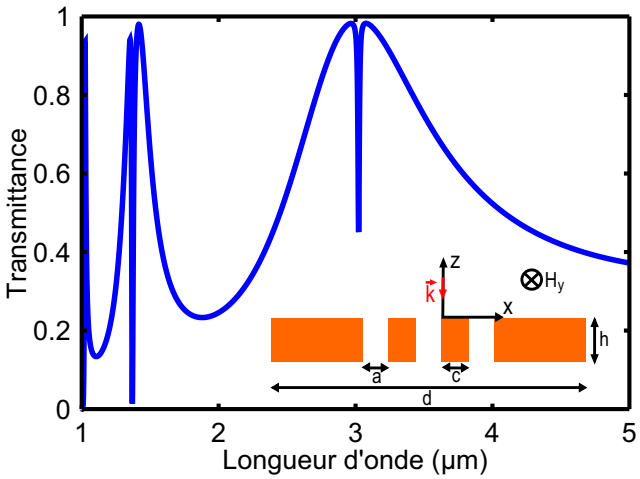

FIGURE 8.3 – Transmission dans l'ordre zéro du réseau métallique à motif complexe à 3 fentes identiques pour une onde arrivant sur le réseau en incidence normale et polarisée TM. Les fentes du réseaux sont de géométries identiques (largeur $a = 0.08\mu$m, hauteur $h = 1\mu$m) et espacées les unes des autres de $c = 0.08\mu$m. La période du réseau est $d = 1\mu$m et l'indice de réfraction du métal est $n = 0.15 + 24.9i$.

Dans le tableau 8.1, sont comparés les temps de calcul des indices effectifs dans les fentes entre le calcul complet et le calcul avec les matrices creuses. On détermine les indices effectifs avec une précision équivalente à 10^{-6}. Lorsque le réseau ne comporte qu'une fente par période, les deux techniques de calculs ont la même efficacité pour le calcul de l'indice effectif. Par contre, lorsqu'on augmente le nombre de fentes dans le motif, le calcul par les matrices creuses devient de plus en plus favorable, allant jusqu'à être 18 fois plus rapide pour 5 structurations par période.

Nous avons montré l'intérêt de ces matrices creuses pour des structures modérément complexes. Les matrices creuses permettent également d'aborder des situations autrement plus complexes comportant par exemple plusieurs dizaines de structurations dans une période, comme nous le verrons ultérieurement dans le cas de la lentille plasmonique, ou bien dans le cas de motifs 2D.

[11] SKIGIN et al., « Transmission resonances of metallic compound gratings with subwavelength slits ».

TABLE 8.1 – Comparaison du temps de calcul des indices effectifs dans chaque fente lorsqu'on résout le problème complet et lorsqu'on utilise des matrices creuses pour le réseau à motifs complexes, en imposant la même précision sur la valeur des indices effectifs. Nous étudions l'effet de l'augmentation du nombre de fentes, et donc de la complexité du problème sur ce temps de calcul. La dernière colonne synthétise le gain de temps obtenu en utilisant les matrices creuses.

Nombre de fentes	Temps de calcul du problème complet	Temps de calcul du problème creux	Nombre de nœuds	Facteur d'accélération
1	0.14 s	0.12 s	60	1
2	0.46 s	0.14 s	120	3
3	1.4 s	0.20 s	180	7
4	3.0 s	0.29 s	240	10
5	5.8 s	0.32 s	300	18

8.2 Algorithme de matrices S réduit

8.2.1 Principe de l'algorithme réduit

Dans la section précédente, nous avons vu qu'il était possible de résoudre des équations aux valeurs propres en utilisant les matrices creuses pour accélérer les calculs, mais dans ce cas, on ne détermine qu'un petit nombre de modes n et la matrice des vecteurs propres Q est rectangulaire de taille $(N_m \times n)$ où N_m est le nombre de points de maillage. Les matrices modales du champ électromagnétique E et H définies dans les équations 7.19 et 7.20 sont également rectangulaires lorsqu'on utilise les matrices creuses. Afin de distinguer les matrices obtenues par la résolution complète et la résolution par les matrices creuses, nous noterons $\tilde{E}$ et $\tilde{H}$ les matrices modales rectangulaires.

Lorsqu'on va écrire les expressions des sous-matrices S pour l'interface entre les régions 1 et 2, on aura donc des produits de matrices rectangulaires.

$$S_{11} = 1 - 2(1 + \tilde{H}_1^{-1}\tilde{H}_2\tilde{E}_2^{-1}\tilde{E}_1)^{-1}, \tag{8.2}$$

$$S_{21} = \tilde{E}_2^{-1}\tilde{E}_1(1 - S_{11}). \tag{8.3}$$

Les matrices $\tilde{H}_1$, $\tilde{H}_2$, $\tilde{E}_1$ et $\tilde{E}_2$ sont de taille $(N_m \times n)$. Une représentation schématique de ces équations dans la version classique où les matrices sont carrées et dans cette version réduite avec des matrices rectangulaires est donnée en figure 8.4.

Les matrices S_{11} et S_{21} sont dans les deux cas des matrices carrées, mais leurs dimensions sont réduites de $(N_m \times N_m)$ à $(n \times n)$. Il apparaît clairement que le nombre d'opérations pour obtenir les expressions des sous-matrices S est considérablement réduit, passant de $O(N_m^3)$ à $O(N_m^2 n)$. Cependant, pour calculer ces sous-matrices, il faut obtenir une sous-matrice des inverses des matrices H et E. Nous avons envisagé de calculer les approximations données

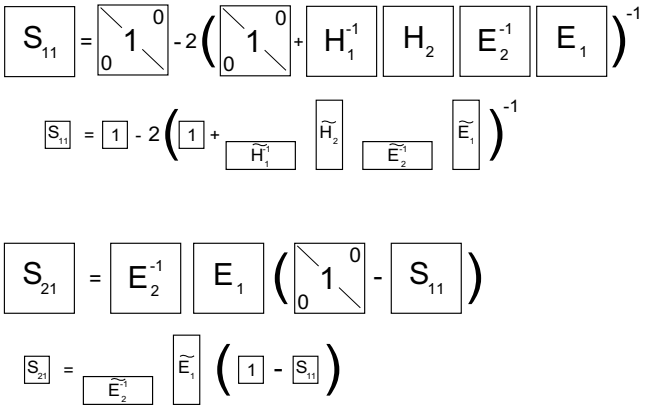

FIGURE 8.4 – Représentation schématique des équations matricielles définissant les sous-matrices S. Les dimensions des carrés et rectangles sont une figuration des tailles des matrices. Dans les expressions classiques, toutes les matrices sont carrées de taille $(N_m \times N_m)$, alors que dans la version réduite, les matrices utilisées dans les équations sont rectangulaires de taille $(N_m \times n)$ ou $(n \times N_m)$, et mènent à des sous matrices S de taille $(n \times n)$.

par Moore-Penrose[12] des matrices $\tilde{H}$ et $\tilde{E}$. Mais au final, nous utilisons une approche qui permet d'obtenir les valeurs exactes des sous-matrices. Pour obtenir la matrice $\tilde{H}$, il faut résoudre l'équation aux valeurs propres $MH = HK$. Nous multiplions cette équation à droite et à gauche par H_p^{-1}.

$$H^{-1}M = KH^{-1}. \tag{8.4}$$

Il apparaît alors que les lignes de H^{-1} sont les vecteurs propres à gauche de la matrice M. Pour obtenir $\tilde{H}$ et $\tilde{H}^{-1}$, il faut résoudre l'équation aux valeurs propres à matrices creuses en calculant à la fois les vecteurs propres à gauche et à droite.

8.2.2 Applications

Comme exemple de la convergence de cet algorithme, nous étudions un réseau de guides d'onde métalliques infinis, composé de 41 fentes par période. Ces structures sont capables de focaliser la lumière dans la fente centrale de chaque période à une distance donnée. Cet exemple est inspiré de l'article de Verslegers *et al.*[13], et se rapproche de l'étude des lentilles plasmoniques[14].

Le réseau étudié est décrit en figure 8.5, les fentes d'air s'élargissent linéairement des côtés vers le centre de la période de 10 à 30 nm et sont séparées par des murs d'or d'épaisseur constante 20 nm. La période est donc de 1.63μm. L'onde incidente est polarisée TM, arrive en incidence normale et a une longueur d'onde $\lambda = 2\mu$m pour laquelle on prend une permittivité

[12] MOORE, « On the reciprocal of the general algebraic matrix » ; PENROSE, « A generalized inverse for matrices ».

[13] VERSLEGERS et al., « Deep-subwavelength focusing and steering of light in an aperiodic metallic waveguide array ».

[14] VERSLEGERS et al., « Planar lenses based on nanoscale slit arrays in a metallic film » ; VERSLEGERS et al., « Planar metallic nanoscale slit lenses for angle compensation ».

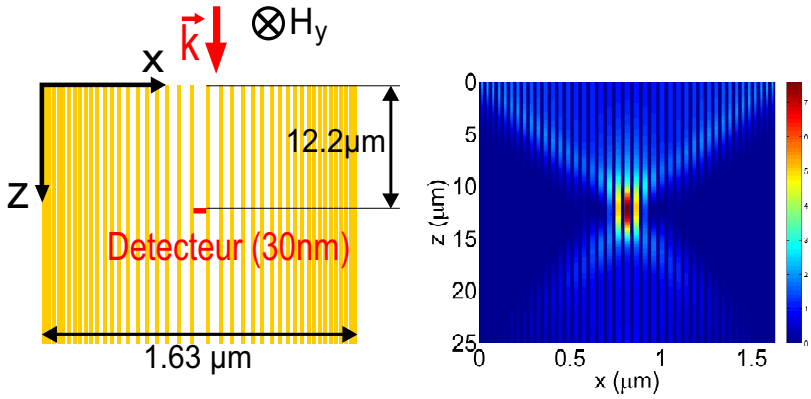

FIGURE 8.5 – A gauche, le schéma du réseau à 41 fentes infinies. A droite, la carte de champ électrique calculée avec BMM en utilisant un maillage de 664 nœuds, mais en n'utilisant que 50 modes pour le calcul des matrices S.

de l'or $\epsilon_m = -156 + 15.2i$. L'intensité du champ électrique est calculée avec 50 modes sur la figure 8.5. On observe qu'il y a concentration de l'énergie dans la fente centrale à une distance $z = 12.2\mu$m.

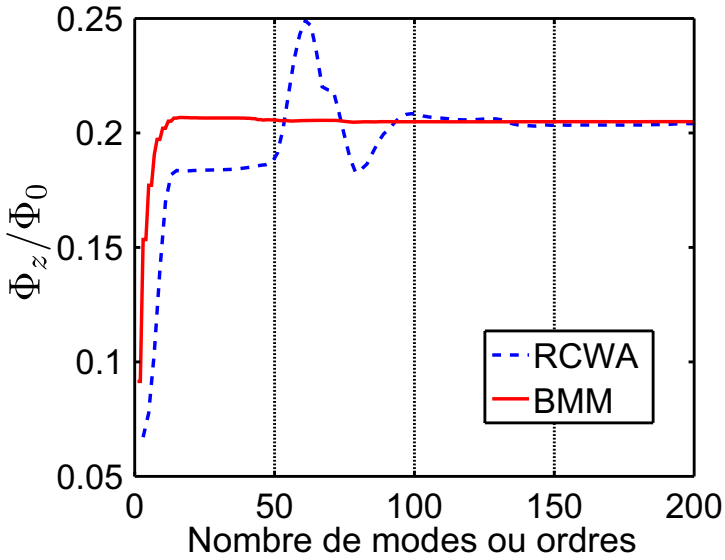

FIGURE 8.6 – Comparaison de la convergence du flux de Poynting normalisé Φ_z/Φ_0 calculé par la méthode RCWA d'une part et la méthode BMM avec calcul du nombre de modes réduits d'autre part, en fonction du nombre d'ordres dans RCWA et du nombre de modes conservés dans BMM. La convergence est obtenue autour de 14 modes retenus dans le cas de BMM, alors qu'il faut dix fois plus d'ordres à RCWA pour converger.

Comme critère de qualité d'une méthode numérique sur cette structure, nous allons donc prendre le flux de Poynting vertical sur la fente centrale de 30 nm de large à la position de focalisation $z = 12.2\mu$m, normalisé par le flux de Poynting incident sur une période. Nous

comparons la convergence obtenue lorsqu'on utilise notre méthode B-spline (BMM) avec un nombre réduit de modes mais un maillage beaucoup plus fin de 664 nœuds, et le calcul complet fait par RCWA. Les deux courbes de convergence en fonction du nombre de modes conservés (BMM) et du nombre d'ordres (RCWA) sont tracées dans la figure 8.6. Alors que l'algorithme de matrices S réduit ne nécessite que 14 modes pour converger, il faut dix fois plus d'ordres pour que RCWA converge. Les modes déterminés par BMM sont sélectionnées de telle sorte à avoir tous les modes propagatifs et les modes évanescents dont le module de la valeur propre k_z sont les plus faibles (cette méthode de sélection est de plus compatible avec les possibilités de la libraire ARPACK). Il faut noter que cet algorithme pourrait tout aussi bien être utilisé avec les modes calculés par RCWA. Mais comme RCWA manipule des matrices qui sont denses, l'étape de résolution de l'équation aux valeurs propres serait très loin d'être aussi efficace. Or il faut rappeler que c'est cette étape de résolution de l'équation aux valeurs propres qui est la plus coûteuse en nombre d'opérations.

8.3 Conclusion

Dans cette partie, nous avons vu qu'il était possible de résoudre une équation générale aux valeurs propres avec des matrices creuses grâce à une approximation permettant de se ramener à une équation aux valeurs propres non généralisée, mais dont la matrice est toujours creuse. La résolution de ces systèmes se fait par des algorithmes spécifiques aux matrices creuses et qui sont très étudiés par la communauté mathématique. Cette technique de résolution permet de déterminer un nombre limité de valeurs et vecteurs propres en un temps de calcul raisonnable même lorsque la taille de la matrice augmente. Elle est donc très favorable pour des systèmes comprenant plusieurs dizaines de structurations 1D, et est très prometteuse pour le calcul de structures 2D complexes. Nous avons également décrit l'adaptation de l'algorithme de matrices S, lorsque le nombre de modes est réduit et que les matrices manipulées deviennent rectangulaires. Il est possible de calculer la réponse électromagnétique d'une structure en n'utilisant qu'une sélection de modes parmi lesquels les modes propagatifs.

Chapitre 9 Modèle analytique multifentes et multisillons

Sommaire

9.1 Modèle analytique multi-fentes et multi-sillons 124

9.1.1 Présentation du problème 124

9.1.2 Modèle mono-mode 125

9.1.3 Modèle d'impédance de surface 127

9.1.4 Résolution pour les réseaux multi-sillons 128

9.1.5 Résolution pour une combinaison de fentes et de sillons 131

9.2 Exemple numérique : Réseaux de multi-sillons 132

9.3 Conclusion 133

Nous avons développé dans les deux chapitres précédents une méthode numérique pour des structures relativement générales, *i.e.* des empilements de couches structurées suivant une dimension. Il est possible de faire des calculs encore plus rapides lorsque sont compris les processus physiques dominants. Nous avons vu dans le chapitre précédent l'importance de ce type d'approximation pour les structures plasmoniques. Pour le cas classique des réseaux de fentes métalliques, il a été montré qu'en respectant certaines contraintes sur les paramètres géométriques, on pouvait ne prendre en compte que le mode propagatif dans la couche métallique en obtenant des résultats très proches de ceux prévus par une méthode numérique complète[1].

Dans ce chapitre, nous étendons ces résultats à des couches métalliques structurées par une combinaison de sillons et/ou de fentes qui respectent les mêmes contraintes géométriques que précédemment. On utilise un calcul analytique de matrices S d'interfaces pour raccorder les modes propagatifs des sillons/fentes aux décompositions de Rayleigh dans les milieux homogènes semi-infinis. Nous discutons du potentiel et des limites de ce modèle à un mode propagatif par structuration, *i.e.* un sillon ou une fente.

[1] Lalanne et al., « One-mode model and Airy-like formulae for one-dimensional metallic gratings ».

9.1 Modèle analytique multi-fentes et multi-sillons

9.1.1 Présentation du problème

Les structures que nous décrivons sont des réseaux métalliques à motif complexe, *i.e.* plusieurs sillons ou fentes dans une période, invariants dans une direction de l'espace. Nous appelons sillon une fente non débouchante. Le schéma de la structure étudiée est présenté en figure 9.1. Le métal est de permittivité ϵ_m, les fentes sont remplies d'un matériau de permittivité $\epsilon_d = n_d^2$. L'onde incidente est polarisée TM, a un angle d'incidence θ. Les calculs sont présentés dans le cas où la région semi-infinie supérieure est composée d'air, mais il est également possible d'imaginer des empilements de couches diélectriques. La $l-ième$ fente du motif périodique est caractérisée par sa hauteur $h^{(l)}$ et sa largeur $w^{(l)}$.

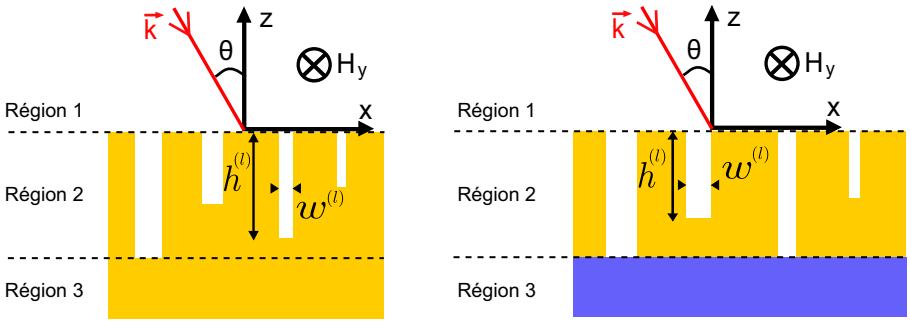

FIGURE 9.1 – Deux types de réseaux à motif complexes. A gauche, le réseau est uniquement en réflexion et est composé de plusieurs sillons non débouchants. A droite, le réseau agit à la fois en réflexion et transmission et consiste en une combinaison de sillons et de fentes débouchantes sur la région 3.

Nous distinguerons les deux types de réseaux décrits sur la figure 9.1. Les réseaux de premier type sont composés de sillons uniquement, ils n'ont donc pas de réponse en transmission, et il n'est nul besoin de considérer ce qui se passe en-dessous de la couche réseau métallique. Pour le deuxième type de réseau, on considère une combinaison de fentes débouchantes sur une troisième région et de sillons non débouchants, qui va avoir une réponse aussi bien en transmission qu'en réflexion. Ce second cas inclut les réseaux où toutes les structurations sont débouchantes sur la région 3.

Comme la structure est périodique, de période d, on peut faire une décomposition de Rayleigh du champ magnétique dans le milieu semi-infini supérieur :

$$H_{y1}(x,z) = \exp(i(k_x^{(0)}x - k_{z1}^{(0)}z)) + \sum_{n\in\mathbb{Z}} R_n \exp(i(k_x^{(n)}x + k_z^{(n)}z)), \tag{9.1}$$

avec :

$$k_x^{(n)} = k_x^{(0)} + n\frac{2\pi}{d}, \tag{9.2}$$

$$k_x^{(n)2} + k_z^{(n)2} = n_1^2 k_0^2, \tag{9.3}$$

$$k_x^{(0)} = \sin(\theta)k_0 = \frac{2\pi\sin(\theta)}{\lambda}, \tag{9.4}$$

où n désigne l'ordre de diffraction du réseau et les R_n sont les amplitudes complexes des ordres réfléchis.

Pour les réseaux comportant des fentes débouchantes, on écrit également la décomposition de Rayleigh dans la région 3 :

$$H_{y3}(x,z) = \sum T_n \exp(i(k_x^{(n)}x - k_{z3}^{(n)}(z+h))), \tag{9.5}$$

où T_n sont les amplitudes complexes des ordres transmis.

Dans la couche structurée, le champ magnétique va s'écrire comme une somme de modes. Dans le chapitre suivant, quelques hypothèses géométriques permettront de simplifier la description du problème dans cette couche.

9.1.2 Modèle mono-mode

Pour simplifier le modèle, nous allons nous placer dans le cas où chaque structuration n'est le siège que d'un mode propagatif et que les différentes structurations sont suffisamment éloignées les unes des autres par rapport à l'épaisseur de peau pour qu'il n'y ait pas de couplage entre modes de structurations voisines. Ces hypothèses imposent un certain nombre de contraintes sur la géométrie, déjà présentées dans la thèse de G. Vincent[2]. Dans notre cas, ces contraintes vont se généraliser à chaque sillon ou fente. Pour éviter qu'il y ait couplage à travers la paroi métallique, les différentes structurations doivent être espacées d'une distance assez grande devant l'épaisseur de peau δ du métal. Par ailleurs, chaque structuration doit être suffisamment haute pour que les modes évanescents ne jouent pas de rôle ($h^{(l)}$ grand) et est suffisamment étroite pour qu'il n'y ait qu'un seul mode propagatif ($w^{(l)}$ petit). Par ailleurs, dans le cas des réseaux comprenant des fentes, il faut ajouter une condition sur la profondeur des sillons pour éviter que le mode propagatif se couple avec les plasmons se propageant sur l'interface inférieure. Il faut donc que $H - h^{(l)}$ soit grand devant l'épaisseur de peau du métal, où H est l'épaisseur totale de la couche réseau.

Dans la l-ème structuration, on ne va donc considérer qu'un mode propagatif :

$$H_{y2}^{(l)} = X_0^{(l)}(x)(A_0^{(l)}\exp(ik_{zd}^{(l)}(z+h^{(l)})) + B_0^{(l)}\exp(-ik_{zd}^{(l)}z)) \tag{9.6}$$

où $k_{zd}^{(l)}$ est la composante suivant z du vecteur d'onde du mode fondamental dans la l-ième structuration, et $X_0^{(l)}(x)$ représente la dépendance en x de ce mode. Le mode propagatif est symétrique par rapport au centre de la structuration et est maximum au niveau de ce centre. Dans l'article de Lalanne *et al.*[3], les auteurs se placent dans le cas du métal parfait, et la dépendance en x est alors rect $\left(\frac{x}{w}\right)$. Pour avoir une meilleure description du mode, nous

[2] Vincent, « Réseaux métalliques sub-longueur d'onde, applications á l'optique infrarouge. »
[3] Lalanne et al., « One-mode model and Airy-like formulae for one-dimensional metallic gratings ».

reprenons l'hypothèse d'une amplitude sinusoïdale faite dans la thèse de G. Vincent[4], et on écrit alors :

$$H_{y2}^{(l)} = \cos(k_{xd}^{(l)}(x - x_{centrefente}^{(l)}))(A_0^{(l)} \exp(ik_{zd}^{(l)}(z + h^{(l)})) + B_0^{(l)} \exp(-ik_{zd}^{(l)} z)) \tag{9.7}$$

où $k_{xd}^{(l)}$ est la composante suivant x du vecteur d'onde du mode fondamental dans la l-ième structuration et $x_{centrefente}^{(l)}$ est la position du centre de la fente.

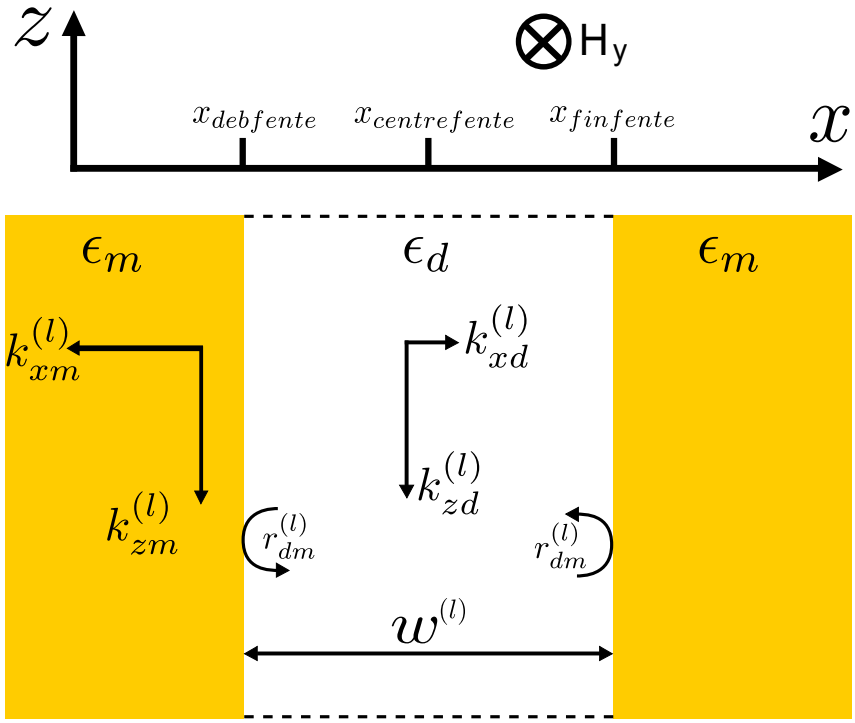

FIGURE 9.2 – Les structurations dans le réseau sont équivalentes à des guides d'onde étroits et épais, indépendants les uns des autres. Dans chaque structuration, il n'y a qu'un mode propagatif de vecteur d'onde $k_d^{(l)}$ dans la fente, et de vecteur d'onde $k_m^{(l)}$ dans le métal.

La l-ième structuration peut être vue comme un guide d'onde représentée sur la figure 9.2. Le mode fondamental fait un aller-retour et deux réflexions (on définit le coefficient de réflexion TM de Fresnel $r_{dm}^{(l)}$) sur les parois métalliques, vérifiant donc l'équation :

$$(r_{dm}^{(l)})^2 \exp(2ik_{xd}^{(l)} w^{(l)}) = 1. \tag{9.8}$$

En utilisant l'expression du coefficient de réflexion TM, on obtient la condition :

$$\frac{k_{xd}^{(l)}}{\epsilon_d}\left[\frac{1 - \exp(ik_{xd}^{(l)} w^{(l)})}{1 + \exp(ik_{xd}^{(l)} w^{(l)})}\right] + \frac{k_{xm}^{(l)}}{\epsilon_m} = 0. \tag{9.9}$$

[4]VINCENT, « Réseaux métalliques sub-longueur d'onde, applications á l'optique infrarouge. »

Par ailleurs, comme la largeur des fentes est très faible, on a $|k_{xd}^{(l)} w^{(l)}| \ll 1$, ce qui implique que $\left[\frac{1-\exp(ik_{xd}^{(l)} w^{(l)})}{1+\exp(ik_{xd}^{(l)} w^{(l)})}\right] \sim \frac{-ik_{xd}^{(l)} w^{(l)}}{2}$ et on peut donc réécrire l'équation précédente :

$$\frac{k_{xm}^{(l)}}{\epsilon_m} = \frac{k_{xd}^{(l)}}{\epsilon_d}\left(\frac{ik_{xd}^{(l)} w^{(l)}}{2}\right). \tag{9.10}$$

En utilisant les relations $k_{xd}^{(l)} = \sqrt{\epsilon_d k_0^2 - k_{zd}^{(l)}}$ et $k_{xm}^{(l)} = \sqrt{\epsilon_m k_0^2 - k_{zm}^{(l)}}$, et la continuité à l'interface métal/diélectrique dans la fente de la composante suivant z du vecteur d'onde $k_{zm}^{(l)} = k_{zd}^{(l)}$, on peut écrire :

$$k_{xd}^{(l)2} - k_{xm}^{(l)2} = (\epsilon_d - \epsilon_m) k_0^2 \tag{9.11}$$

En combinant les équations 9.10, 9.11, on obtient une équation qui dépend de $k_{xd}^{(l)}$:

$$k_{xd}^{(l)2}\left[1 + k_{xd}^{(l)2}\left(\frac{\epsilon_m}{\epsilon_d}\right)^2 \frac{w^{(l)2}}{4}\right] = (\epsilon_d - \epsilon_m) k_0^2. \tag{9.12}$$

La résolution de cette équation donne les expressions des composantes du vecteur d'onde dans chaque fente en fonction des paramètres géométriques, des permittivités des matériaux et de la longueur d'onde[5] :

$$k_{xd}^{(l)} = \sqrt{\epsilon_d} k_0 \sqrt{\frac{-2i}{w^{(l)} k_0 \sqrt{\epsilon_m}}} \tag{9.13}$$

$$k_{zd}^{(l)} = \sqrt{\epsilon_d} k_0 \sqrt{1 + \frac{2i}{w^{(l)} k_0 \sqrt{\epsilon_m}}} \tag{9.14}$$

9.1.3 Modèle d'impédance de surface

Nous avons donné les expressions du champ magnétique dans chacune des 3 régions pour les deux types de réseaux étudiés. Pour résoudre le problème, on va utiliser la continuité aux interfaces entre régions en distinguant les zones d'interface métal/diélectrique et diélectrique/diélectrique. A une interface diélectrique/diélectrique (correspondant aux ouvertures des sillons ou fentes), on écrit la continuité de la composante tangentielle du champ magnétique H_y et du champ électrique $E_x = \frac{1}{\epsilon}\partial_z H_y(x, z)$.

Pour les interfaces métal/diélectrique, comme le métal est très absorbant, le champ électromagnétique ne pénètre presque pas dans le métal. On va utiliser le modèle d'impédance de surface comme condition, son utilisation pour les métaux dans l'infrarouge a été largement étudiée dans la littérature[6]. L'impédance de surface est définie à l'interface par le

[5] Collin et al., « Waveguide modes in metallic nanoscale apertures: coupled surface plasmon polaritons and skin depth effects ».

[6] Depine, « Perfectly conducting diffraction grating formalisms extended to good conductors via the surface impedance boundary condition » ; Depine et al., « Diffraction Grating EfficienciesConformal Mapping Method for a Good Real Conductor » ; Depine et al., « Surface impedance boundary condition for metallic diffraction gratings in the optical and infrared range ».

rapport des composantes tangentielles du champ électrique et du champ magnétique. En polarisation TM, elle s'écrit donc : $Z' = \frac{E_x}{H_y}$. On va faire l'hypothèse que l'impédance de surface normalisée par l'impédance du champ incident seul $Z_i = \frac{E_i}{H_i}$ est constante et vaut $Z = \frac{Z'}{Z_i} = n_j/\sqrt{\epsilon_m}$, où n_j est l'indice de la région semi-infinie supérieure ($j = 1$) ou inférieure ($j = 3$)[7]. On peut alors remplacer dans l'équation de Maxwell-Ampère l'expression du champ E_x et écrire :

$$\partial_z H_{yj}(x,z) = \eta_j H_{yj}(x,z), \tag{9.15}$$

avec

$$\eta_j = \frac{\epsilon_j k_0}{i\sqrt{\epsilon_m}}. \tag{9.16}$$

9.1.4 Résolution pour les réseaux multi-sillons

Conditions de continuité

Pour résoudre le problème, on va écrire la continuité du champ électromagnétique aux interfaces diélectrique/diélectrique et le modèle d'impédance de surface aux interfaces métal/diélectrique. In fine, nous allons avoir :

<u>En $z = 0$:</u>

Au niveau du sillon, entre $x^{(l)}_{debfente}$ et $x^{(l)}_{finfente}$:

$$H_{y1}(x,0) = H^{(l)}_{y2}(x,0) \tag{9.17}$$

$$\frac{1}{\epsilon_1}\partial_z H_{y1}(x,z)|_{z=0} = \frac{1}{\epsilon_d}\partial_z H^{(l)}_{y2}(x,z)|_{z=0} \tag{9.18}$$

En dehors du sillon :

$$\partial_z H_{y1}(x,z)|_{z=0} = \eta_1 H_{y1}(x,0) \tag{9.19}$$

avec $\eta_1 = \frac{\epsilon_1 k_0}{i\sqrt{\epsilon_m}}$

<u>En $z = -h^{(l)}$:</u>

Pour chaque sillon, entre $x^{(l)}_{debfente}$ et $x^{(l)}_{finfente}$:

$$\partial_z H^{(l)}_{y2}(x,z)|_{z=-h^{(l)}} = \eta_2 H_{y2}(x,-h^{(l)} \tag{9.20}$$

avec $\eta_2 = \frac{\epsilon_d k_0}{i\sqrt{\epsilon_m}}$

[7] Vincent, « Réseaux métalliques sub-longueur d'onde, applications á l'optique infrarouge. »

Résolution du problème

On commence par relier $A_0^{(l)}$ et $B_0^{(l)}$ par l'équation (9.20). Ensuite, on projette l'équation 9.1 sur la base de Rayleigh (produit scalaire par $\exp(-ik_x^{(m)}x)$) et on l'intègre sur une période en z=0 ($\int_0^d H_{y1}e^{(-ik_x^{(m)}x)} = \delta_{0,m}d + R_m d$). On décompose cette intégrale suivant qu'on est sur une interface diélectrique/diélectrique ou métal/diélectrique et grâce aux équations de continuité (9.17,9.19), on les réécrit sous la forme d'intégrales dépendant de $H_{y2}^{(l)}$ et $\partial_z H_{y1}$.

On complète l'intégrale sur $\partial_z H_{y1}$ pour qu'elle couvre toute la période, et les intégrales complémentaires sur les fentes sont exprimées en fonction de $H_{y2}^{(l)}$ grâce à l'équation (9.18). Ces différentes intégrales sont calculables, et on peut alors écrire une équation reliant les R_m aux $A_0^{(l)}$.

Enfin, pour chaque fente d'indice l, on intègre l'équation de continuité (9.17) entre $x_{debfente}^{(l)}$ et $x_{finfente}^{(l)}$ et on remplace les R_m grâce à l'équation obtenue précédemment, ce qui conduit à un système linéaire où l'inconnue est le vecteur A_0.

Expression des termes

En suivant les consignes précédentes, on va pouvoir définir par souci de lisibilité les termes suivants où l'indice (l) se réfère à la l-ème structuration et l'indice (m) à l'ordre dans la décomposition de Rayleigh :

$$\gamma^{(l)} = \frac{ik_{zd}^{(l)} - \eta_2}{ik_{zd}^{(l)} + \eta_2} \tag{9.21}$$

$$\beta_{\pm}^{m} = 1 \pm \frac{ik_z^{(m)}}{\eta_1} \tag{9.22}$$

$$\alpha_{\pm}^{(l)} = 1 \pm \frac{i\epsilon_1 k_{zd}^{(l)}}{\eta_1 \epsilon_2^{(l)}} \tag{9.23}$$

On a alors :

$$B_0^{(l)} = \gamma^{(l)} \exp(-ik_{zd}^{(l)} h^{(l)}) A_0^{(l)} \tag{9.24}$$

On définit également les intégrales suivantes (dont le calcul est trivial)

$$I^{(m,l)} = \int_{x_{debfente}^{(l)}}^{x_{finfente}^{(l)}} e^{ik_x^{(m)}x} dx \tag{9.25}$$

$$K_{fente}^{(l)} = \int_{x_{debfente}^{(l)}}^{x_{finfente}^{(l)}} \cos(k_{xd}^{(l)}(x - x_{centre}^{(l)}))dx \tag{9.26}$$

$$Int_{fente}^{(m,l)} = \frac{1}{2}\int_{x_{debfente}^{(l)}}^{x_{finfente}^{(l)}} \cos(k_{xd}^{(l)}(x - x_{centre}^{(l)}))e^{ik_x^{(m)}x}dx \tag{9.27}$$

On écrit alors l'expression des R_m

$$R_m = -\delta_{0,m}\frac{\beta_+^{(0)}}{\beta_-^{(0)}} + \frac{1}{d\beta_-^{(m)}}\sum_l A_0^{(l)} Int_{fente}^{(m,l)}(\alpha_-^{(l)}e^{ik_{zd}^{(l)}h^{(l)}} + \gamma^{(l)}\alpha_+^{(l)}e^{-ik_{zd}^{(l)}h^{(l)}}) \tag{9.28}$$

L'équation à résoudre est du type $[\![M]\!][\![A_0]\!] = [\![C]\!]$ où le vecteur $[\![A_0]\!]$ a pour coefficients les $A_0^{(l)}$ des différentes fentes. Les termes du vecteur $[\![C]\!]$ s'écrivent :

$$[\![C]\!]_{ii} = I^{(0,ii)}(1 - \frac{\beta_+^{(0)}}{\beta_-^{(0)}}) \tag{9.29}$$

et les termes de la matrice $[\![M]\!]$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}[\![M]\!]_{(ii,jj)} =& \delta_{ii,jj}K_{fente}^{ii}(e^{ik_{zd}^{(jj)}h^{(jj)}} + \gamma^{(jj)}e^{-ik_{zd}^{(jj)}h^{(jj)}}) \\ &- (\alpha_-^{(jj)}e^{ik_{zd}^{(jj)}h^{(jj)}} + \gamma^{(jj)}\alpha_+^{(jj)}e^{-ik_{zd}^{(jj)}h^{(jj)}})\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{d\beta_-^{(m)}}Int_{fente}^{(m,jj)}I^{(m,ii)}\end{aligned} \tag{9.30}$$

Pour le calcul, on va tronquer la décomposition de Rayleigh au delà d'un certain nombre d'ordres.

Au final, pour exprimer la réflectance, on utilise la formule suivante :

$$R_{totale} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{Re(k_{z1}^{(n)})}{k_{z1}^{(0)}}|R_n|^2 \tag{9.31}$$

Complexité du problème

Pour résoudre en pratique le problème, on va tronquer les sommes sur les ordres de Rayleigh. Tous les termes définis précédemment correspondent à des produits de matrices de dimension caractéristique $max(N_{\text{ordres}}, N_{\text{sillons}})$. Le système linéaire à résoudre est de taille N, où N est le nombre de structurations.

9.1.5 Résolution pour une combinaison de fentes et de sillons

Conditions de continuité

Dans le cas d'un réseau avec une combinaison de sillons et de fentes (ou bien un réseau de fentes uniquement), les conditions à l'interface $z = 0$ seront les mêmes, de même que pour chaque sillon en $z = -h^{(l)}$. Par contre, pour les fentes débouchantes, en $z = -H$, où H est l'épaisseur de la couche réseau, on écrit des conditions supplémentaires :

En $z = -H$:

Au niveau de la fente, entre $x^{(l)}_{debfente}$ et $x^{(l)}_{finfente}$:

$$H_{y3}(x, -H) = H^{(l)}_{y2}(x, -H) \tag{9.32}$$

$$\frac{1}{\epsilon_3}\partial_z H_{y3}(x, z)|_{z=-H} = \frac{1}{\epsilon_2}\partial_z H^{(l)}_{y2}(x, z)|_{z=-H} \tag{9.33}$$

En dehors de la fente :

$$\partial_z H_{y3}(x, z)|_{z=-H} = \eta_3 H_{y3}(x, -H) \tag{9.34}$$

avec $\eta_3 = \frac{\epsilon_3 k_0}{i\sqrt{\epsilon_m}}$

Principe de la résolution

Le principe de la résolution est le même que pour le réseaux de sillons, mais il faut également exprimer les inconnues supplémentaires T_m. On fera donc une projection de la somme de Rayleigh sur chaque terme en $z = -H$, et en intégrant sur une période pour obtenir leur expression en fonction des vecteurs A_0 et B_0. Pour les fentes, la relation entre $A^{(l)}_0$ et $B^{(l)}_0$ n'est pas aussi triviale que pour les sillons. On aura donc deux inconnues à résoudre par fente contre une seule par sillon dans la résolution finale du système linéaire.

Expression des termes

On va traiter de manière distincte les sillons ($h^{(l)} < H$) et les fentes ($h^{(l)} = H$). On reprend les variables définies précédemment, et on va définir également :

$$\beta^m_{\pm 3} = 1 \pm \frac{ik^{(m)}_{z3}}{\eta_3} \tag{9.35}$$

$$\alpha^{(l)}_{\pm 3} = 1 \pm \frac{i\epsilon_3 k^{(l)}_{zd}}{\eta_3 \epsilon_2} \tag{9.36}$$

Par ailleurs, on écrit, uniquement dans le cas des sillons :

$$B_0^{(l)} = \gamma^{(l)} exp(-ik_{zd}^{(l)} h^{(l)}) A_0^{(l)} \tag{9.37}$$

L'expression des termes R_m est la même, et on définit également les T_m :

$$T_m = \frac{e^{-ik_{z3}H}}{d\beta_{-3}^{(m)}} \sum_l Int_{fente}^{(m,l)} (A_0^{(l)} \alpha_{+3}^{(l)} + B_0^{(l)} \alpha_{-3}^{(l)} e^{ik_{zd}^{(l)} H}) \tag{9.38}$$

L'équation à résoudre sera :

$$[M] \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0^{\text{fentes}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I^{(0,ii)} \left(1 - \frac{\beta_{3+}^{(0)}}{\beta_{3-}^{(0)}}\right) \\ 0 \end{bmatrix} \tag{9.39}$$

Enfin, pour l'expression des termes de la matrice M, il nous faut distinguer plusieurs cas. Si la colonne jj correspond à un sillon, alors les termes sur les lignes tels que $ii \leq N$, où N désigne le nombre de structurations dans une période, suivent l'équation 9.30. Le principe d'écriture des termes de la matrice M reste le même que dans le cas multi-sillons, mais on pourra calculer à la fois les intensités réfléchie et transmise.

Les intensités réfléchie dans la région 1 et transmise vers la région 3 vont s'écrire :

$$R_{totale} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{Re(k_{z1}^{(m)})}{k_{z1}^{(0)}} |R_m|^2 \tag{9.40}$$

$$T_{totale} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_3} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{Re(k_{z3}^{(m)})}{k_{z1}^{(0)}} |T_m|^2 \tag{9.41}$$

9.2 Exemple numérique : Réseaux de multi-sillons

Pour évaluer la qualité de ce modèle analytique, nous prenons comme exemple le calcul de la réflectivité d'un réseau constitué de 8 sillons de géométries différentes dans de l'or. Les propriétés physiques et l'intérêt de cette structure ont été présentées en détail dans le chapitre 6. Les paramètres de la structure sont détaillés en insert de la figure 9.3. La structure est composée de 8 sillons par période $d = 2.5\mu$m. Chaque sillon a une géométrie propre qui lui permet de résonner à une longueur d'onde donnée. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 6, la réponse spectrale de la structure est plus complexe à prévoir qu'une simple superposition des résonateurs indépendants car les plasmons qui se propagent sur la surface horizontale des murs métalliques séparant chaque sillon vont avoir un effet de couplage. La bonne prise en compte de ces effets de couplage est donc un bon indicateur de la qualité du modèle analytique présenté.

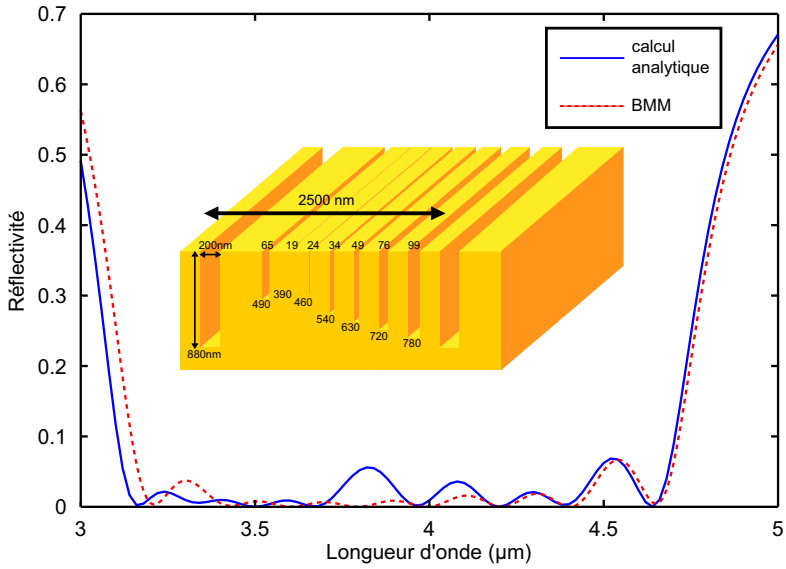

FIGURE 9.3 – Comparaison de la réflectivité en bande 2 pour un réseau de 8 sillons, calculée avec la méthode analytique (courbe bleue continue) ou une méthode exacte (BMM, courbe rouge pointillée).

Dans la figure 9.3, sont comparés les spectres de réflectivité en Bande II ($3 - 5\mu$m) de la structure 8 sillons pour une incidence nulle et une polarisation transverse magnétique obtenus avec un calcul exact (BMM) et le calcul approché (méthode analytique). Pour les deux méthodes, les résultats ont convergé. Le calcul analytique rend bien compte de l'allure qualitative et quantitative du spectre, les huit résonances sont bien marquées et tombent à 0%, même si leur position est un peu décalée par rapport à ce qui est prévu par BMM. La bande d'absorption totale va de 3.2 à 4.6 μm. La méthode analytique donne donc des résultats très proches des calculs exacts pour un temps de calcul très inférieur à celui requis par une méthode exacte comme BMM.

9.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode analytique qui permet de décrire des structures multi-fentes, débouchantes ou non. Cette méthode est valide pour des combinaisons de sillons et de fentes qui respectent certaines conditions géométriques. Elle ne permet pas de prendre en compte les cas particuliers où l'épaisseur d'or entre deux fentes est de l'ordre de grandeur de l'épaisseur de peau.

Cette méthode est utile dans le cadre de la conception de nouvelles structures, pour l'étape d'optimisation des paramètres géométriques d'une structure. Nous allons étudier dans le chapitre suivant la manière dont elle peut être utilisée dans un algorithme métaheuristique,

pour optimiser un absorbant large bande par exemple ou encore simplifier la réalisation technologique d'une telle structure en salle blanche, en imposant des contraintes telles que la profondeur des sillons.

Chapitre 10 Algorithme génétique

Sommaire

10.1 Algorithme génétique 136

10.1.1 Principe de la conception de fonctions optiques 136

10.1.2 Choix de l'algorithme génétique 137

10.1.3 Déroulement de l'algorithme génétique 139

10.1.4 Paramètres et codage de l'algorithme génétique 140

10.2 Exemples d'optimisation de fonctions optiques avec l'algorithme génétique 141

10.2.1 Optimisation d'un absorbant large-bande couvrant une octave . . . 141

10.2.2 Prise en compte de contraintes technologiques 143

10.2.3 Exploration de nouveau concepts 143

10.3 Conclusion et perspectives 145

Dans les chapitres précédents, j'ai développé des méthodes de modélisation qui sont rapides, même pour des structures qui se complexifient. Jusqu'ici, l'optimisation d'une structure pour obtenir une fonction donnée comme une résonance de transmission à une longueur d'onde λ_0 ou une résonance d'absorption se faisait manuellement. Pour ces fonctions qui restent assez simples, l'homme de l'art peut s'aider de la compréhension physique de la structure pour l'optimiser. Par exemple pour un réseau de sillons dans de l'or, s'il exploite la résonance Fabry-Perot, il saura choisir la profondeur des sillons de manière adéquate pour se rapprocher d'un absorbant parfait (voir chapitre 3). Toutefois, pour des structures plus complexes, la réponse optique ne peut pas toujours être prédite (et réciproquement). C'est le cas lors de l'optimisation d'un réseau multi-sillons pour un absorbant large-bande (voir chapitre 6). En effet, il existe alors des couplages entre les différentes structurations qui vont modifier la réponse optique de la structure totale.

D'autre part, lorsque les structures deviennent plus complexes, le temps de calcul de la modélisation augmente considérablement. Dans le même temps, le nombre de paramètres à optimiser augmente également (pour un réseau de 10 sillons, il faudra optimiser largeur, profondeur et espacement de chaque sillon, soit au total 30 paramètres à optimiser un à un), contribuant à rendre l'optimisation manuelle d'une telle structure fastidieuse.

Dans ce chapitre, nous allons décrire une technique d'optimisation utilisant un algorithme génétique, qui est particulièrement adapté aux contraintes de ce problème d'optimisation. Les algorithmes génétiques ou évolutionnaires font partie d'une classe d'algorithmes appelés

métaheuristiques. L'implémentation de l'algorithme génétique dans cette partie s'est appuyée sur les livres de Back et Haupt[1]. Il utilise le modèle analytique multi-sillons à un mode propagatif par sillon et permet de prendre en compte des contraintes technologiques (sillons de même profondeur) ou d'explorer des nouvelles pistes (diélectriques à fort indice dans les sillons) ou encore de tester le potentiel de nouvelles structures.

10.1 Algorithme génétique

10.1.1 Principe de la conception de fonctions optiques

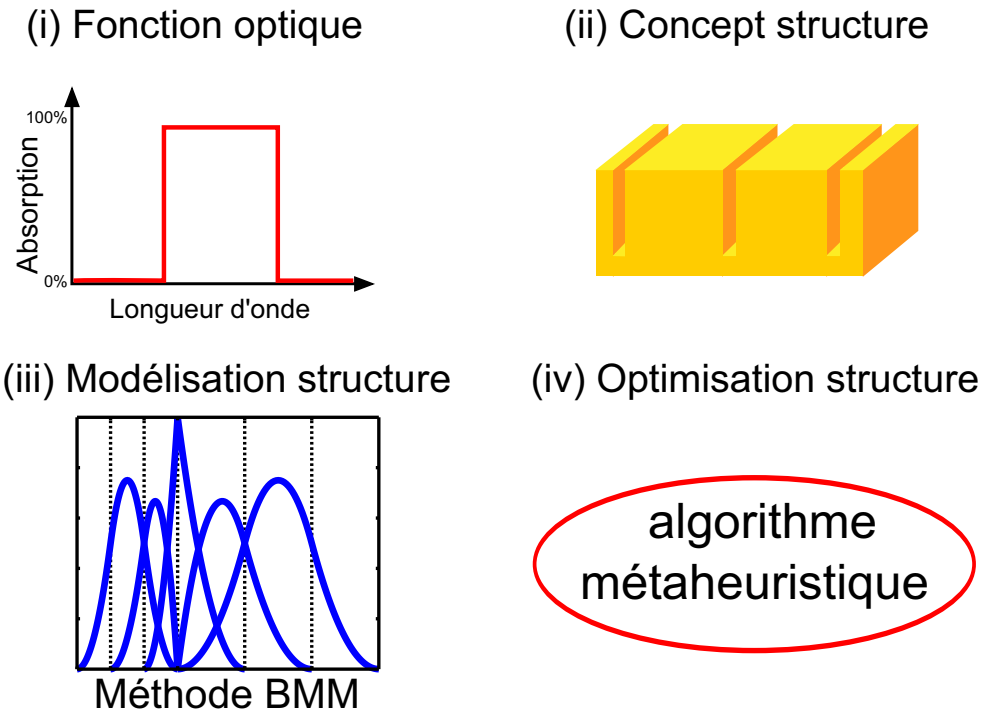

FIGURE 10.1 – Principe général de la conception d'une fonction optique. Il existe un besoin pour une fonction optique (i), par exemple un absorbant large bande. Une structure permettant de coder cette fonction optique a été identifiée, il s'agit d'un réseau de sillons (ii). Pour prédire les caractéristiques optiques de la structure, il faut disposer d'un code de simulation, dans notre cas, on a le choix entre la méthode BMM et le code analytique (iii). Enfin, on va utiliser un algorithme métaheuristique pour optimiser une structure correspondant à la fonction optique cherchée en fonction des paramètres d'entrée (iv).

Le principe général de la conception de fonctions optiques est schématisé dans la figure 10.1. Le point de démarrage de la conception d'une fonction optique est l'identification et la caractérisation de ladite fonction, par exemple pour un filtre passe-bande à grand facteur de

[1] BACK et al., *Advanced algorithms and operators* ; BACK et al., *Basic algorithms and operators* ; HAUPT et al., *Practical genetic algorithms*.

qualité, on cherchera une transmission très élevée à une longueur d'onde donnée et très faible en dehors du gabarit. Dans le cas d'un absorbant large bande, il faudra déterminer la plage de longueurs d'onde sur laquelle on cherche un absorbant total, et éventuellement, les zones sur lesquelles il ne doit pas y avoir absorption (i). Ensuite, il faut identifier une géométrie de structure (réseau de sillons, de fentes,...) qui permette de coder la fonction optique (ii). Un code de modélisation doit être choisi pour simuler la structure. Dans notre cas, on a vu dans les chapitres 7 et 9 qu'on pouvait au choix utiliser la méthode modale B-spline (iii) ou bien un code analytique qui sera plus rapide, mais plus limité dans les géométries pouvant être explorées.

Enfin, on va utiliser un algorithme métaheuristique pour optimiser le concept de structure à la fonction optique choisie dans un cas précis (iv). Un algorithme métaheuristique est une méthode générique qui permet d'optimiser des problèmes très différents, les plus célèbres sont dérivés de systèmes naturels comme le recuit simulé ou l'algorithme génétique.

Les caractéristiques de notre problème d'optimisation nous ont guidés vers l'utilisation de l'algorithme génétique. Nous allons revenir en détail sur ce choix, et sur le déroulement de l'algorithme génétique. Il sera ensuite appliqué à quelques exemples en utilisant le code analytique décrit dans le chapitre 9.

10.1.2 Choix de l'algorithme génétique

Les caractéristiques de l'algorithme génétique, qui va être présenté en détail, correspondent parfaitement aux besoins formulés dans un problème d'optimisation d'une structure plasmonique. En effet, l'optimisation d'une structure plasmonique se caractérise par :

1) Un espace de recherche important, qui s'étend avec la complexité des structures et de fait le nombre de paramètres à optimiser. Les paramètres géométriques à optimiser vont typiquement pouvoir varier dans une gamme de 10 nm à quelques microns.

2) La recherche des paramètres peut se faire dans un espace de valeurs discrètes. Cette possibilité a l'avantage de limiter la dimension de l'espace de recherche et de simplifier l'implémentation de l'algorithme génétique. Par ailleurs, le pas de discrétisation peut être choisi pour être cohérent avec la précision obtenue en fabrication.

3) Il n'existe pas d'algorithme déterministe pour coder la fonction voulue. Dans le cas de réseau de multi-sillons par exemple, il existe des couplages entre les sillons qui empêchent de prévoir la réponse optique de la structure complète à partir des réponses individuelles de chaque sillon.

4) On recherche une solution correcte mais pas nécessairement optimale. Il existe plusieurs configurations possibles qui vont donner une réponse optique satisfaisante.

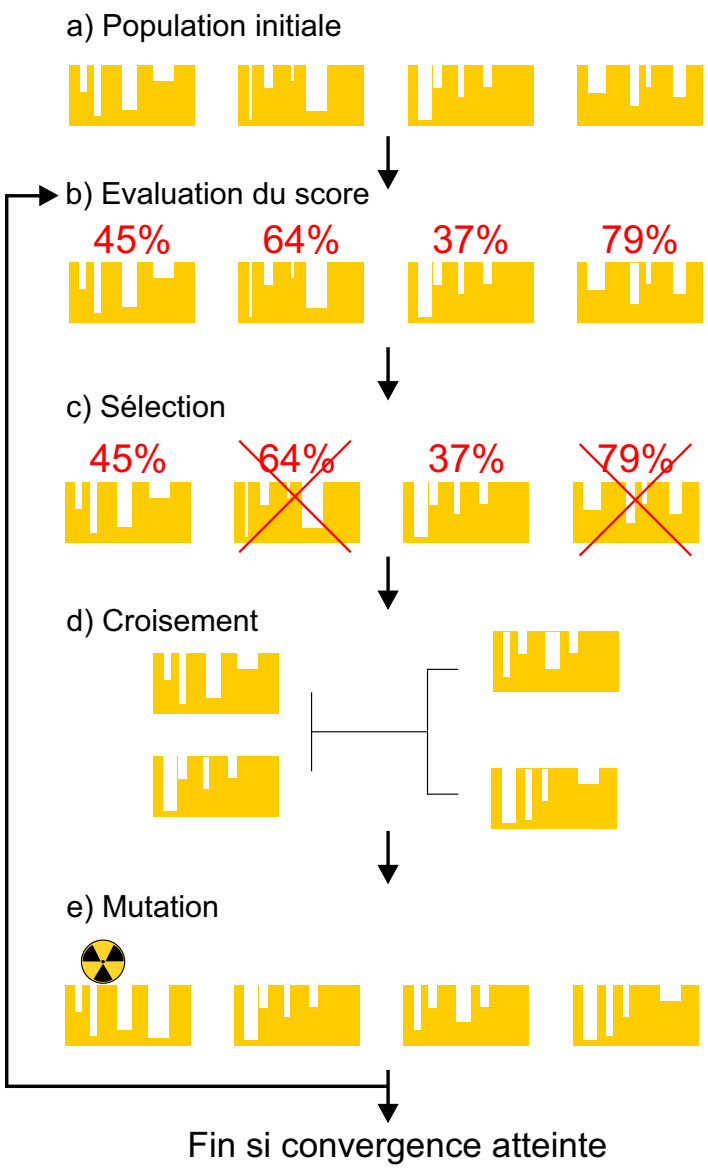

FIGURE 10.2 – Déroulement de l'algorithme génétique. a) Génération d'une population initiale de N individus. b) Évaluation du score de chaque individu par rapport à la fonction visée. c) On garde les individus ayant le meilleur score (ici, le coefficient de réflexion le plus faible). d) Croisement entre les individus restants pour ré-obtenir N individus dans la population. e) Étape de mutation aléatoire qui permet d'éviter de rester bloquer sur un minimum local. Après cette étape, on teste la convergence par rapport au score visé pour évaluer s'il faut relancer une génération à partir de l'étape b).

10.1.3 Déroulement de l'algorithme génétique

Le principe du déroulement de l'algorithme génétique est représenté en figure 10.2, dans le cas de l'optimisation d'une structure multi-sillons. L'algorithme génétique tire son nom de l'analogie qui est faite avec la sélection naturelle dans une espèce. Il commence et finit comme la plupart des méthodes d'optimisation. Au départ, il faut définir les variables à optimiser, une fonction de mérite, un critère de convergence et à la fin d'une itération, il faut tester la convergence de l'algorithme.

L'algorithme génétique commence par le choix d'une géométrie de structure à optimiser (ici, une structure à 4 sillons) et le choix de la fonction de mérite associée (ici, une réflectivité nulle sur une bande spectrale).

(a) On initialise l'algorithme en générant aléatoirement un ensemble de structures que nous appellerons individus. L'ensemble de ces individus constitue la population d'une génération.

(b) On va ensuite évaluer chaque individu vis a vis de la fonction de mérite, ce qui va nous donner un score qu'on cherche à minimiser. Dans notre cas, on veut minimiser la réflectivité moyenne sur la bande spectrale considérée.

(c) On garde les individus qui ont le score le moins élevé pour la génération suivante. Les autres individus ne sont pas conservés pour les étapes suivantes. Le plus souvent, le ratio gardé est de 50 %. Il est également possible de ne conserver que les individus qui ont un score en dessous d'un certain seuil.

(d) Les individus sélectionnés vont être croisés. Il existe plusieurs techniques de croisement, à la fois concernant le choix des individus qui se croisent et pour la manière dont se fait ce croisement. Pour sélectionner les individus qui vont être croisés, on peut au choix faire confiance au hasard ou bien pondérer le hasard des scores de chaque individu ou encore, option qui sera choisie dans la suite, faire un tournoi entre plusieurs individus choisis aléatoirement. L'avantage du tournoi est qu'il mélange astucieusement hasard et qualité de l'individu, et ne nécessite pas, comparé à d'autres choix, de faire d'opérations de tri. Les individus sélectionnés sont ensuite croisés pour en générer des nouveaux et retrouver le même nombre d'individus qu'initialement. Je détaille la technique choisie dans notre implémentation dans la section 10.1.4

(e) La dernière étape d'une itération consiste à introduire des mutations dans la population aléatoirement. Ces mutations permettent d'introduire des paramètres qui n'étaient pas nécessairement présents dans la population initiale et évite à l'algorithme de converger vers un minimum local. Par ailleurs, on évite d'introduire des mutations dans les meilleurs individus. Ce procédé d'élitisme évite d'abandonner une solution qui pouvait être convergente.

Si la condition de fin d'algorithme n'est pas validée, on relance une nouvelle. L'algorithme peut se finir au choix après un certain nombre de générations ou lorsqu'un certain critère a été atteint. On préférera le premier choix, car il est parfois impossible d'atteindre le critère

visé.

10.1.4 Paramètres et codage de l'algorithme génétique

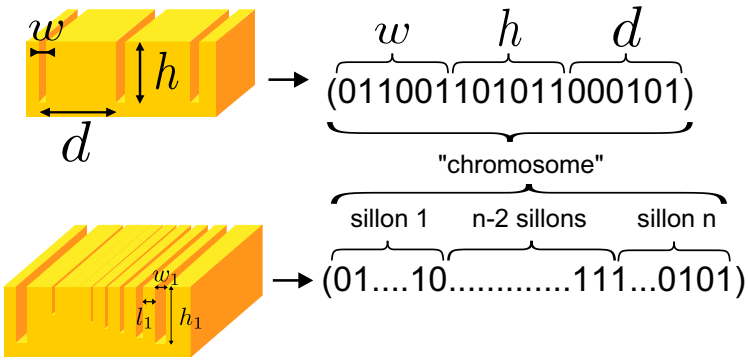

FIGURE 10.3 – Le codage d'une structure se fait par un vecteur binaire. Dans le cas d'un réseau de sillons, ce vecteur ou "chromosome" sera de dimension m. La première partie décrit la largeur du sillon, la seconde la hauteur et la dernière partie du vecteur décrit la période (ou la distance entre deux sillons dans le cas d'un multi-sillons). Dans le cas d'un réseau de n sillons, la structure sera codée par une chaîne binaire de dimension $m \times n$.

Chaque individu, *i.e.* structure multi-sillons, va être représenté par un vecteur binaire permettant de coder les différents paramètres compris dans un ensemble discret. Par analogie biologique, ce vecteur est appelé chromosome, et les différentes sections correspondant aux paramètres sont appelés gènes. Un exemple de codage est donné dans la figure 10.3 dans le cas d'un réseau de sillons et d'un réseau de multi-sillons. Ainsi, l'ensemble de la population initialement générée pourra être décrit sous la forme d'une matrice de dimension $(N_{\text{individus}} \times L_{\text{chromosome}})$. Cette matrice binaire est particulièrement adaptée aux opérateurs de croisement et de mutation. Pour évaluer le score de chaque individu, on appliquera en boucle la fonction de mérite sur chaque ligne de la matrice.

Lors du croisement, on opère par des tournois entre quatre individus choisis aléatoirement. Le procédé classique consiste ensuite à croiser deux individus pour en obtenir deux nouveaux. Un point d'entrecroisement (ou kinétochore) est choisi aléatoirement, le premier parent donnant la partie à la gauche de son chromosome et le second donne la partie à droite. On fait l'inverse pour obtenir un deuxième chromosome. Des techniques plus complexes consistent par exemple à couper le chromosome en plusieurs endroits et à créer le nouveau chromosome à partir de petites portions des chromosomes parentaux. En pratique, j'ai choisi une solution plus simple qui consiste à choisir le point d'entrecroisement à la moitié du chromosome. Nous allons voir dans la suite que ce choix n'entrave pas dans les situations considérées la convergence de l'algorithme génétique.

10.2 Exemples d'optimisation de fonctions optiques avec l'algorithme génétique

10.2.1 Optimisation d'un absorbant large-bande couvrant une octave

On va tester l'utilisation de l'algorithme génétique sur l'optimisation d'un absorbant large-bande couvrant une octave de fréquence en bande 3 (*i.e.* de λ à 2λ). On veut obtenir un absorbant total entre $\lambda_1 = 6\mu$m et $\lambda_2 = 12.8\mu$m avec un réseau de 10 sillons par période. On autorise les limites géométriques suivantes :

* Chaque sillon a une largeur comprise entre 10 nm et 264nm par pas de 2nm,

* Chaque sillon a une profondeur comprise entre 0.1μm et 2.65μm par pas de 10nm,

* La distance entre deux sillons est comprise entre 100 nm et 1375 nm par pas de 5nm.

Les limites peuvent sembler précises, mais elles sont choisies pour que chaque paramètre soit codé par un nombre entier de bits. Ainsi la largeur de chaque sillon est codée par 7 bits, tandis que la profondeur et la distance entre deux sillons sont toutes les deux codées par un octet. Le chromosome équivalent à la géométrie de la structure composée de 10 sillons est donc au final codé sur 230 bits.

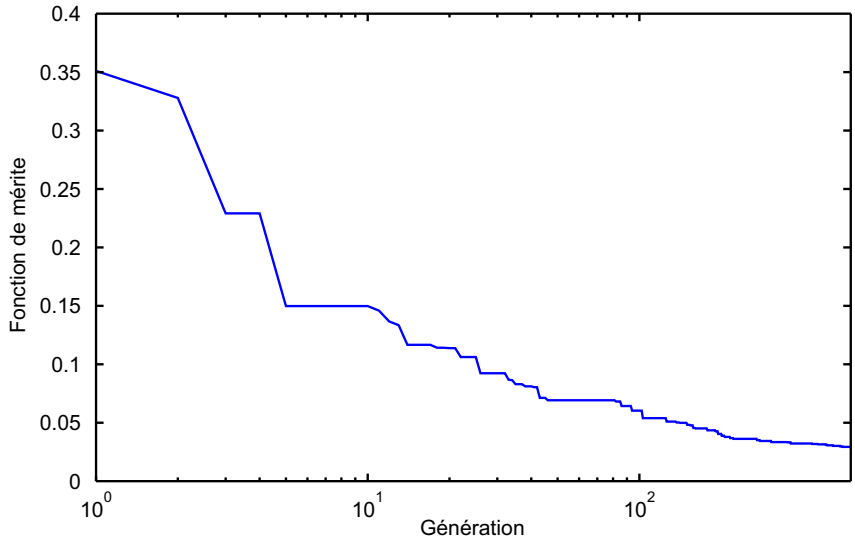

FIGURE 10.4 – Évolution de la réflectivité moyenne entre 6μm et 12.6μm du meilleur individu en fonction de la génération dans l'algorithme génétique.

Du point de vue de l'algorithme génétique, une génération va comprendre 400 individus, on en renouvellera la moitié à chaque nouvelle génération en passant par un système de tournois entre 4 individus sélectionnés. Pour éviter de rester bloqué dans un minimum

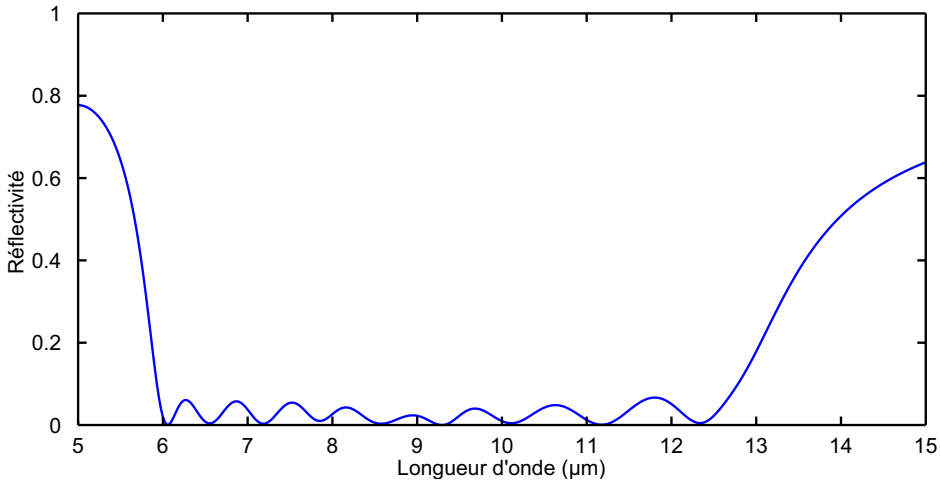

FIGURE 10.5 – Structure 10 sillons absorbant sur un peu plus d'une octave, couvrant la bande 3 de transmission de l'atmosphère. Le spectre montre 9 résonances, ce qui indique que 9 sillons ont été optimisés avec des profondeurs et des largeurs différentes, tandis que le dixième ne joue a priori pas de rôle dans l'absorption (ou bien juste un rôle au second ordre de par son couplage avec les autres sillons.)

local, on génère, à chaque itération, 2% de nouveaux individus aléatoirement, et on fait une mutation aléatoire de 2% en moyenne du code des individus (*i.e.* on change les 0 en 1 et vice-versa). Cependant, pour éviter d'introduire une mutation dans la séquence binaire des meilleurs structures et risquer de les perdre, on interdit la modification des 4% de meilleurs individus.

L'évolution de la fonction de mérite (*i.e.* la réflectivité moyenne entre $\lambda_1 = 6\mu$m et $\lambda_2 = 12.8\mu$m) du meilleur individu de chaque génération est présentée en figure 10.4. L'algorithme converge très rapidement au bout d'une centaine de générations, et va évoluer très légèrement au cours des générations suivantes (l'algorithme a itéré jusqu'à la 2000ème génération, ce qui représente pour indication trois heures de calcul sur un ordinateur haut de gamme (processeur quatre cœurs, 16 Go de Ram)). Le spectre de réflectivité de la structure optimisée à l'issue de l'algorithme génétique est tracé dans la figure 10.5. On a une largeur de bande d'absorption à 90 % de $\Delta\lambda = 6.8\mu$m qui couvre un peu plus d'une octave entre 6μm et 12.8μm. Le spectre est ponctué de 9 résonances avec absorption totale alors qu'on avait placé dix sillons, ce qui indique qu'un des sillons n'a pas de rôle de résonateur. Toutefois, il peut avoir un rôle sur la réponse spectrale de la structure via son couplage avec les autres sillons.

Cet exemple d'application qui a permis de dimensionner la structure présentée au chapitre 6, démontre l'intérêt de l'algorithme génétique comme outil d'optimisation pour des structures validées. Nous allons voir dans la suite qu'il peut également être intéressant pour prendre en compte des contraintes technologiques sur les paramètres de la structure, ainsi que pour explorer le potentiel de nouvelles structures.

10.2.2 Prise en compte de contraintes technologiques

L'algorithme génétique permet d'adapter des concepts de structures ayant des propriétés optiques intéressantes, pour en faire des objets technologiquement concevables. On a vu qu'un réseau multi-sillons pouvait être dimensionné numériquement pour élargir la bande d'absorption totale (voir chapitre 6). Cependant, les sillons sont alors de profondeurs différentes, et il n'y a pas de technique maîtrisée en salle blanche actuellement pour fabriquer des sillons de profondeurs différentes dans une couche épaisse d'or. Les pistes de réalisation actuelles passent toutes par autant d'étapes d'alignement au masqueur électronique qu'il y a de profondeurs différentes. Je propose dans cette partie d'étudier deux alternatives qui permettent de réduire, voire de s'affranchir de ces contraintes technologiques.

Dans le premier cas, on va chercher une structure à 4 sillons de profondeurs identiques ($h = 720$nm) qui absorbe entre 4 et 4.8μm. L'algorithme génétique doit alors combiner des sillons ayant des indices effectifs différents pour que chacun résonne à une longueur d'onde différente, et doit également optimiser les couplages entre sillons. La structure optimisée et son spectre de réflectivité sont montrés dans la figure 10.6a. On distingue trois pics de résonance, ce qui signifie qu'un des sillons ne résonne pas, mais son couplage joue un rôle dans cette structure car il n'est pas possible d'obtenir le même spectre avec 3 sillons uniquement.

Il n'est a priori pas possible d'élargir encore la bande d'absorption, même en plaçant plus de sillons si on conserve la contrainte d'une même profondeur. Mais on peut imaginer par exemple une structure avec deux épaisseurs différentes qui couvrira toute la bande $3-5\mu$m.

Dans le second cas étudié, je vais cette fois-ci chercher à diminuer la hauteur des sillons en les remplissant de matériau à fort indice. J'ai choisi d'optimiser un absorbant entre 4 et 4.8μm avec un réseau de 4 sillons remplis de germanium ($\epsilon = 16$), en imposant une profondeur constante de 220nm. La courbe de réflectivité de la structure optimisée et la géométrie correspondante sont présentées dans la figure 10.6b. La situation physique est la même que dans le cas des sillons remplis d'air, il y a seulement trois résonances malgré les quatre sillons, et il n'est pas possible d'élargir plus la bande d'absorption sans rajouter une autre profondeur possible. Cette structure ouvre néanmoins la voie à une réalisation technologique plus facile, les plots de germanium pouvant être liftés après une insolation électronique.

10.2.3 Exploration de nouveau concepts

L'algorithme génétique permet aussi d'étudier le potentiel de nouveaux concepts. La méthode analytique développée précédemment permet de modéliser des structures en transmission, combinaison de sillons et de fentes. On va étudier la capacité de ces structures à réaliser des filtres passe-bande.

La fonction de mérite est spécifique, car on va non seulement chercher à obtenir une transmission importante sur la bande souhaitée, mais en plus, on va vouloir que la structure

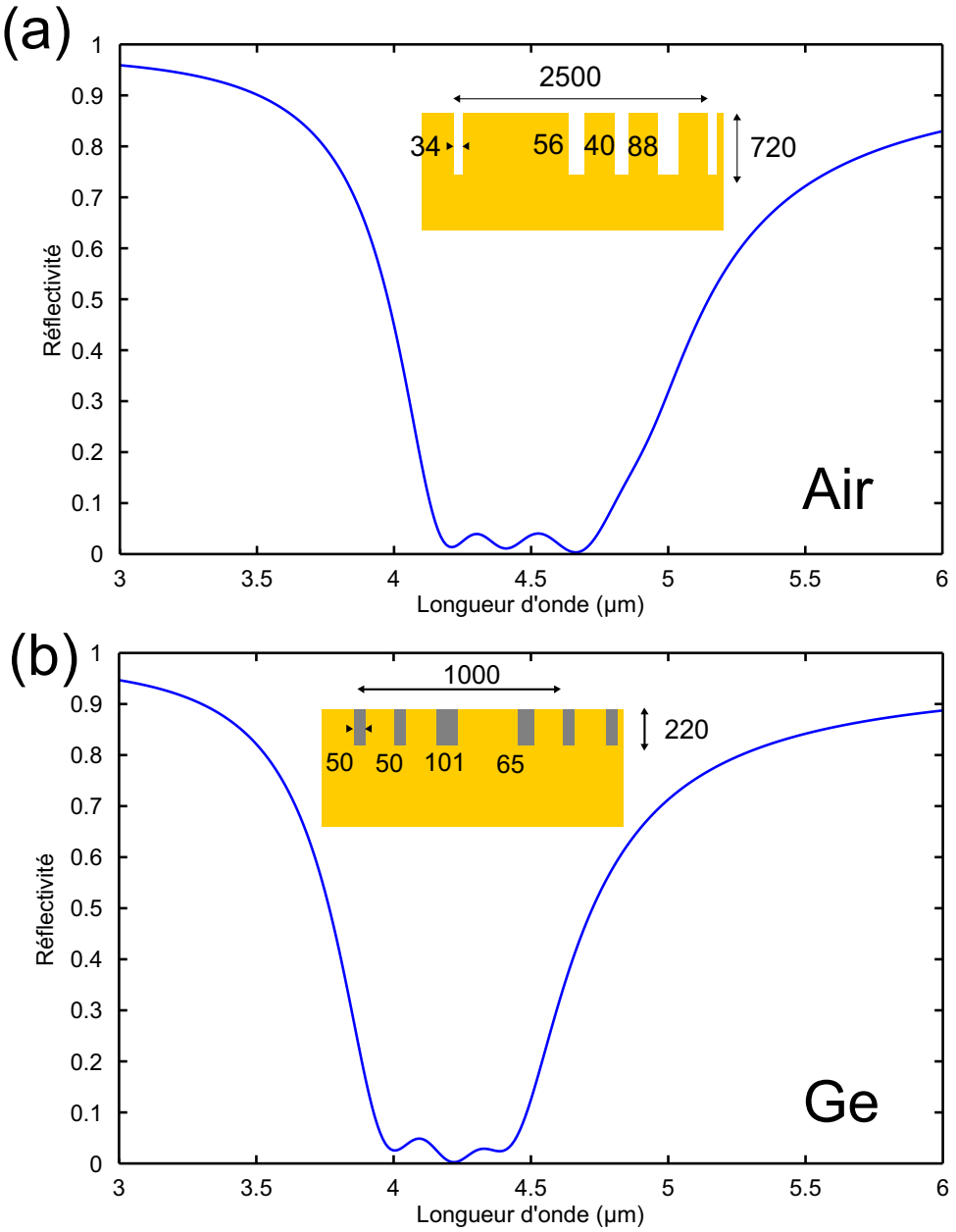

FIGURE 10.6 – Spectre de réflectivité d'une structure optimisée avec l'algorithme génétique avec 4 sillons par période faisant la même profondeur. La géométrie de la structure optimisée est décrite en insert, les valeurs des paramètres sont en nanomètres. (a) Les sillons sont remplis d'air, ce qui impose une profondeur de 620 nm pour avoir des résonances entre 4μm et 5μm. (b) Les sillons sont remplis de Germanium, ce qui permet de réduire la profondeur des sillons à 220 nm en bande 2.

ait un bon taux de réjection hors de la zone de transmission. On a choisi de coder la fonction

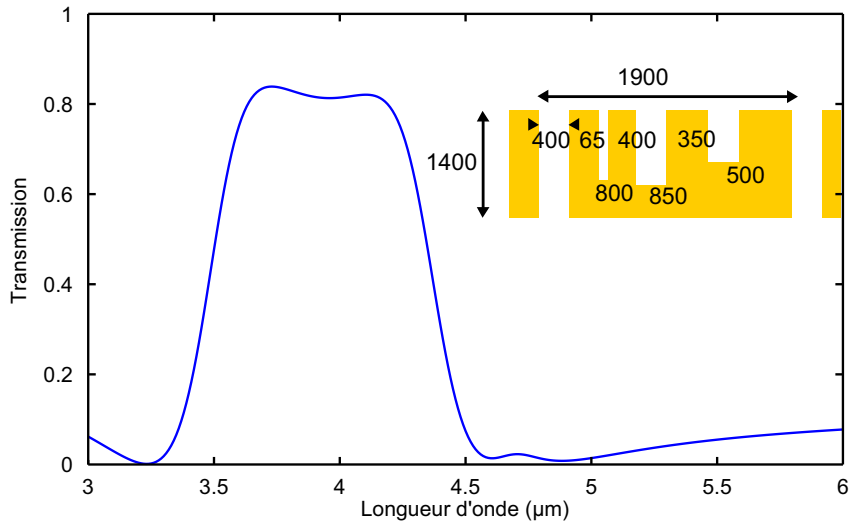

FIGURE 10.7 – Spectre de transmission du filtre optimisé avec l'algorithme génétique pour transmettre l'énergie entre 3.5 et 4.3μm avec un bon taux de réjection ailleurs. La structure optimisée est la combinaison d'une fente débouchante et de trois sillons non débouchants qui vont permettre via des couplages d'élargir la bande de transmission.

de mérite de la façon suivante :

$$f_{\text{mérite}} =< 1 - T >_{\lambda_2}^{\lambda_3} + 0.5(< T >_{\lambda_1}^{\lambda_2} + < T >_{\lambda_3}^{\lambda_4}) \tag{10.1}$$

où $< T >$ représente la transmission moyenne entre deux longueurs d'onde. Dans notre cas, on va optimiser un filtre passe-bande en bande 2, en choisissant les valeurs $\lambda_1 = 3\mu$m, $\lambda_2 = 3.5\mu$m, $\lambda_3 = 4.3\mu$m et $\lambda_4 = 5\mu$m. Le spectre de transmission du filtre optimisé est montré en figure 10.7, on obtient une transmission de plus de 80 % sur une largeur de bande de plus de 0.6μm et le taux de réjection est très bon avec moins de 10 % de transmission sur le reste de la bande 2.

10.3 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, j'ai montré que l'algorithme génétique est un candidat idéal pour optimiser des structures plasmoniques complexes. Il est particulièrement efficace avec un code analytique, et a permis d'optimiser des réseaux de multi-sillons absorbant sur plus d'une octave. Par ailleurs, il intègre dans son espace de recherche les éventuelles contraintes technologiques. Enfin, on a vu qu'il permet d'explorer le potentiel de structures, en l'occurrence une combinaison de sillons et de fentes débouchantes dans de l'or, pour concevoir de nouvelles fonctions optiques. J'ai optimisé un exemple particulièrement marquant d'un filtre passe bande de largeur de bande 0.6μm en bande 2. L'intérêt de cet algorithme a été montré ici sur des structures privées de plusieurs degrés de liberté, à la fois par choix mais également

car le modèle analytique doit répondre à certaines contraintes géométriques. On aperçoit tout le potentiel qu'aurait cet algorithme génétique couplé avec une méthode numérique exacte comme BMM. C'est le travail de thèse entrepris par Quentin Lévesque au sein de nos équipes.

Conclusion et perspectives

Lors de cette thèse, je me suis intéressé d'une part à la conception de structures plasmoniques agissant en absorption et d'autre part à des méthodes de modélisation permettant de réduire le temps de calcul.

Dans les deux premières parties, je me suis intéressé aux résonateurs de type métal / isolant / métal (MIM), et en particulier au système réseau de sillons à grand rapport d'aspect. Cette structure est le siège de résonances de type Fabry-Perot qui mènent à une absorption totale indépendante de l'angle. La validation expérimentale de ces prédictions théoriques demandait de lever quelques verrous technologiques, les techniques usuelles ne permettant pas de faire des sillons dans une couche métallique épaisse. J'ai donc développé une technique de fabrication pour obtenir des réseaux de sillons à grand rapport d'aspect ($\gtrsim 10$). Son principe est basé sur l'utilisation d'un moule en semiconducteur dopé (GaAs) sur lequel est déposé de l'or par croissance électrolytique. Par ailleurs, un sous-produit de cette technologie, le réseau de murs en arséniure de gallium a des propriétés remarquables dans le térahertz (résonances de type phonons polaritons), et peut être utilisé pour faire de la modulation optique, sujet étudié dans la thèse de Simon Vassant[2]. J'ai dimensionné et fabriqué un réseau de sillons ayant une résonance dans les bandes 2 et 3 de transmission de l'atmosphère dans l'infrarouge. Les caractérisations angulaires de cet échantillon ont confirmé les prédictions théoriques et ce paradoxe de "l'or noir" (*i.e.*, un miroir métallique structuré sur une fraction de sa surface absorbe toute l'énergie incidente à sa longueur d'onde de résonance). La couche structurée peut en fait être vue comme un métamatériau d'indice très élevé ($n \simeq 20$). J'ai complété la théorie publiée en 2005 par Shen *et al.* dans Physical Review Letters en effectuant des mesures complémentaires dans le plan des sillons qui montrent une dépendance angulaire de la résonance non prise en compte dans le modèle initial de couche diélectrique équivalente. L'énergie absorbée dans le réseau est dissipée principalement sur les parois métalliques des

[2] Vassant, « Contrôle optique et électrique de réflectivité THz assisté par phonon-polaritons de surface. »

sillons. Nous avons décrit le mécanisme responsable de l'effet de focalisation ("funneling") de l'énergie dans les sillons très sub-longueurs d'onde grâce à une décomposition du champ en ses parties propagatives et évanescentes. La focalisation à la résonance est en fait due au couplage entre l'onde incidente et le champ évanescent, tandis que le flux de Poynting lié au champ évanescent seul ne fait que redistribuer l'énergie sur la surface du réseau, mais ne participe pas à l'entrée d'énergie dans l'ouverture du sillon. On peut passer à des structures non-polarisantes (et donc absorbant omnidirectionnel) en fabriquant des réseaux de sillons entrecroisés. Cette structure est intéressante pour la détection infrarouge, on peut en effet imaginer placer un matériau absorbant dans les sillons et optimiser la structure pour que la concentration se fasse essentiellement dans ce matériau. Elle peut ainsi permettre de signer spectralement les pixels de détecteurs infrarouge.

D'autre part, le réseau de sillons est un composant de base pour l'étude de phénomènes ou dispositifs plus complexes. Ainsi, j'ai montré qu'il peut y avoir apparition d'un couplage fort entre les plasmons de surface et le mode localisé qui mène alors à deux états hybridés. Le premier état hybridé est caractérisé par une réflectivité spéculaire nulle, l'énergie incidente est réfléchie vers le premier ordre de diffraction du réseau tandis que le second état mène à une absorption quasi-totale à très grand facteur de qualité ($Q > 100$) dont la position dépend de l'angle d'incidence. La valeur du facteur de qualité est liée à l'énergie stockée en champ proche. Cette résonance à grand facteur de qualité pourrait être utilisée pour la détection de gaz ou d'espèces biochimiques, car elle permet de sonder une large gamme de longueurs d'onde avec une grande finesse spectrale. Par ailleurs, nous nous sommes intéressés à des structures plus complexes combinant plusieurs résonateurs MIM. La combinaison de plusieurs sillons, adéquatement dimensionnés, peut conduire à un élargissement de la bande d'absorption totale sans contrepartie. Nous avons démontré cet effet dans le cas de deux résonateurs MIM rubans placés dans la même période. Ces structures permettent également de trier les photons absorbés vers le résonateur MIM responsable de la résonance. La complexification des géométries multiplient les possibilités des dispositifs plasmoniques, permettant ainsi d'obtenir une réponse spectrale sculptée.

Dans une deuxième partie, j'ai décrit mes travaux sur le développement de méthodes de modélisation et d'optimisation de structures. L'objectif est de pouvoir dimensionner en un temps raisonnable et sur des calculateurs standard des structures complexes, en particulier dans mon cas les résonateurs multi-sillons. J'ai développé une méthode modale basée sur les fonctions B-splines. Cette méthode a deux avantages majeurs, elle utilise un maillage non-uniforme, ce qui permet de raffiner le maillage au niveau des interfaces (discontinuité de la permittivité) et surtout, les matrices obtenues sont creuses. J'ai donné des pistes d'utilisation de ces matrices creuses qui semblent particulièrement prometteuses pour accélérer les calculs et permettre la modélisation rapide de structures 2D. Enfin, j'ai aussi développé un modèle analytique à un mode par structuration pour décrire les combinaisons de sillons et/ou fentes. Cette méthode utilisée avec un algorithme génétique permet de dimensionner des structures absorbantes sur une large bande, par exemple une octave s'étalant de 6 μm à 12 μm. Ceci constitue une démonstration de principe de l'utilisation d'un algorithme métaheuristique, et montre le potentiel qu'aurait cet algorithme génétique couplé avec une méthode numérique

exacte comme BMM.

Bibliographie

Anker, J.N., W.P. Hall, O. Lyandres, N.C. Shah, J. Zhao et R.P. Van Duyne. « Biosensing with plasmonic nanosensors ». Dans : *Nature materials* 7.6 (2008), p. 442–453 (cf. p. 68).

Back, T., D.B. Fogel et Z. Michalewicz. *Advanced algorithms and operators*. IOP Publishing Ltd. Bristol, UK, UK, 1999. isbn : 0750306653 (cf. p. 136).

— *Basic algorithms and operators*. IOP Publishing Ltd., 1999. isbn : 0750306645 (cf. p. 136).

Bai, Z. *Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems*. Society for Industrial Mathematics, 2000. isbn : 0898714710 (cf. p. 115).

Berenger, J.P. « Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves ». Dans : *Journal of computational physics* 127.2 (1996), p. 363–379 (cf. p. 99).

Besbes, M., J. Hugonin, P. Lalanne, S. van Haver, O. Janssen, A. Nugrowati, M. Xu, S. Pereira, H. Urbach, A. van de Nes et al. « Numerical analysis of a slit-groove diffraction problem ». Dans : *Journal of the European Optical Society* (2007) (cf. p. 97).

Billaudeau, C., S. Collin, C. Sauvan, N. Bardou, F. Pardo et J.L. Pelouard. « Angle-resolved transmission measurements through anisotropic two-dimensional plasmonic crystals ». Dans : *Optics letters* 33.2 (2008), p. 165–167. issn : 0146-9592 (cf. p. 41).

Bohm, D. et D. Pines. « A collective description of electron interactions. I. Magnetic interactions ». Dans : *Physical Review* 82.5 (1951), p. 625 (cf. p. 8).

Bonod, N., G. Tayeb, D. Maystre, S. Enoch et E. Popov. « Total absorption of light by lamellar metallic gratings ». Dans : *Optics express* 16.20 (2008), p. 15431–15438 (cf. p. 31).

Bouchon, P., F. Pardo, R. Haïdar et J.L. Pelouard. « Fast modal method for subwavelength gratings based on B-splines formulation ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 27.4 (2010), p. 696–702 (cf. p. 98).

Bouchon, P., R. Haïdar, F. Pardo et J.L. Pelouard. « Simulations of nano-optics devices with a fast B-spline modal method ». Dans : *Proceedings of SPIE*. 2010 (cf. p. 98).

Brin, S. et L. Page. « The anatomy of a large-scale hypertextual Web search engine* 1 ». Dans : *Computer networks and ISDN systems* 30.1-7 (1998), p. 107–117. issn : 0169-7552 (cf. p. 113).

Brongersma, M.L. et P.G. Kik. *Surface plasmon nanophotonics*. Springer Verlag, 2007. isbn : 140204349X (cf. p. 113).

Collin, S., G. Vincent, R. Haïdar, N. Bardou, S. Rommeluère et J.L. Pelouard. « Nearly Perfect Fano Transmission Resonances through Nanoslits Drilled in a Metallic Membrane ». Dans : *Physical Review Letters* 104.2 (2010), p. 027401 (cf. p. 110).

Collin, Stéphane, Fabrice Pardo et Jean-Luc Pelouard. « Waveguide modes in metallic nanoscale apertures: coupled surface plasmon polaritons and skin depth effects ». Dans : *Optics express* 15 (2007), p. 4310–4320 (cf. p. 22, 127).

Cox, MG. « The Numerical Evaluation of B-Splines* ». Dans : *IMA Journal of Applied Mathematics* 10.2 (1972), p. 134–149 (cf. p. 100).

De Boor, C. « On calculating with B-splines ». Dans : *J. Approx. Theory* 6.1 (1972), p. 50–62 (cf. p. 100).

Depine, R.A. « Perfectly conducting diffraction grating formalisms extended to good conductors via the surface impedance boundary condition ». Dans : *Appl. Opt* 26 (1987), p. 2348–2354 (cf. p. 127).

Depine, R.A. et JM Simon. « Diffraction Grating EfficienciesConformal Mapping Method for a Good Real Conductor ». Dans : *Journal of Modern Optics* 29.11 (1982), p. 1459–1473. issn : 0950-0340 (cf. p. 127).

— « Surface impedance boundary condition for metallic diffraction gratings in the optical and infrared range ». Dans : *Journal of Modern Optics* 30.3 (1983), p. 313–322. issn : 0950-0340 (cf. p. 127).

Ebbesen, TW, HJ Lezec, HF Ghaemi, T. Thio et PA Wolff. « Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays ». Dans : *Nature* 391.6668 (1998), p. 667–669 (cf. p. 18).

Fano, U. « Atomic theory of electromagnetic interactions in dense materials ». Dans : *Physical Review* 103.5 (1956), p. 1202–1218. issn : 0031-899X (cf. p. 8).

— « The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves) ». Dans : 158 (1941), p. 253 (cf. p. 20).

Garcia-Vidal, FJ et L. Martin-Moreno. « Transmission and focusing of light in one-dimensional periodically nanostructured metals ». Dans : *Physical Review B* 66.15 (2002), p. 155412 (cf. p. 31).

Gierak, J. « Focused ion beam technology and ultimate applications ». Dans : *Semiconductor Science and Technology* 24 (2009), p. 043001 (cf. p. 34).

Granet, G. « Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 16 (1999), p. 2510–2516. issn : 0740-3232 (cf. p. 107).

Hao, J., J. Wang, X. Liu, W.J. Padilla, L. Zhou et M. Qiu. « High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial ». Dans : *Applied Physics Letters* 96.25 (2010), p. 251104. issn : 0003-6951 (cf. p. 31, 43, 82).

Hao, J., L. Zhou et M. Qiu. « Nearly total absorption of light and heat generation by plasmonic metamaterials ». Dans : *Physical Review B* 83.16 (2011), p. 165107 (cf. p. 31, 43).

Haupt, R.L., S.E. Haupt et J. Wiley. *Practical genetic algorithms*. Wiley Online Library, 1998. isbn : 0471188735 (cf. p. 136).

Herschel, W. « Experiments on the Refrangibility of the Invisible Rays of the Sun. By William Herschel, LL. DFRS ». Dans : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 90 (1800), p. 284–292. issn : 0261-0523 (cf. p. 11).

— « Investigation of the Powers of the Prismatic Colours to Heat and Illuminate Objects; With Remarks, That Prove the Different Refrangibility of Radiant Heat. To Which is Added, an Inquiry into the Method of Viewing the Sun Advantageously, with Telescopes of Large Apertures and High Magnifying Powers. By William Herschel, LL. DFRS ». Dans : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 90 (1800), p. 255–283. issn : 0261-0523 (cf. p. 11).

Hessel, A. et AA Oliner. « A new theory of Wood's anomalies on optical gratings ». Dans : *Applied Optics* 4.10 (1965), p. 1275–1297. issn : 0003-6935 (cf. p. 21).

Hutley, MC et D. Maystre. « The total absorption of light by a diffraction grating ». Dans : *Optics communications* 19.3 (1976), p. 431–436 (cf. p. 21).

Jouy, P., Y. Todorov, A. Vasanelli, R. Colombelli, I. Sagnes et C. Sirtori. « Coupling of a surface plasmon with localized subwavelength microcavity modes ». Dans : *Applied Physics Letters* 98 (2011), p. 021105 (cf. p. 68, 69).

Kabashin, A. V., P. Evans, S. Pastkovsky, W. Hendren, G. A. Wurtz, R. Atkinson, R. Pollard, V. A. Podolskiy et Zayats. « Plasmonic nanorod metamaterials for biosensing ». Dans : *Nature Mater.* 8 (2009), p. 867–871 (cf. p. 68).

Kittel, C. et P. McEuen. *Introduction to solid state physics*. T. 4. Wiley New York, 1986 (cf. p. 8).

Kretschmann, E. « Die bestimmung optischer konstanten von metallen durch anregung von oberflächenplasmaschwingungen ». Dans : *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 241.4 (1971), p. 313–324. issn : 0939-7922 (cf. p. 16).

Kretschmann, E. et H. Raether. « Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light(Surface plasma waves excitation by light and decay into photons applied to nonradiative modes) ». Dans : *Zeitschrift für Naturforschung, Teil A* 23 (1968), p. 2135 (cf. p. 16).

Kurokawa, Y. et H.T. Miyazaki. « Metal-insulator-metal plasmon nanocavities: Analysis of optical properties ». Dans : *Physical Review B* 75.3 (2007), p. 035411 (cf. p. 82).

Lalanne, P. et G.M. Morris. « Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 13.4 (1996), p. 779–784 (cf. p. 97, 98, 105, 107).

Lalanne, P. et J.P. Hugonin. « Numerical performance of finite-difference modal methods for the electromagnetic analysis of one-dimensional lamellar gratings ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 17.6 (2000), p. 1033–1042 (cf. p. 113).

Lalanne, P., JP Hugonin, S. Astilean, M. Palamaru et KD Möller. « One-mode model and Airy-like formulae for one-dimensional metallic gratings ». Dans : *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* 2 (2000), p. 48 (cf. p. 22, 123, 125).

Lalanne, P., C. Sauvan, JP Hugonin, JC Rodier et P. Chavel. « Perturbative approach for surface plasmon effects on flat interfaces periodically corrugated by subwavelength apertures ». Dans : *Physical Review B* 68.12 (2003), p. 125404 (cf. p. 53).

Langville, A.N. et C.D. Meyer. *Google page rank and beyond*. Princeton Univ Pr, 2006. isbn : 0691122024 (cf. p. 113, 115).

Le Perchec, J., P. Quémerais, A. Barbara et T. López-Ríos. « Controlling strong electromagnetic fields at subwavelength scales ». Dans : *Physical review letters* 97.3 (2006), p. 36405 (cf. p. 76).

Le Perchec, J., Y. Desieres et R.E. de Lamaestre. « Plasmon-based photosensors comprising a very thin semiconducting region ». Dans : *Applied Physics Letters* 94 (2009), p. 181104 (cf. p. 31, 43, 82).

Le Perchec, J., P. Quémerais, A. Barbara et T. López-Ríos. « Why metallic surfaces with grooves a few nanometers deep and wide may strongly absorb visible light ». Dans : *Physical Review Letters* 100.6 (2008), p. 66408 (cf. p. 31).

Lehoucq, R.B., D.C. Sorensen et C. Yang. *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods*. Siam, 1998 (cf. p. 98, 114, 116).

Lévêque, G. et O.J.F. Martin. « Tunable composite nanoparticle for plasmonics ». Dans : *Optics letters* 31.18 (2006), p. 2750–2752. issn : 1539-4794 (cf. p. 31, 43, 82).

Li, L. « Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings ». Dans : *JOSA A* 13.5 (1996), p. 1024–1035. issn : 1520-8532 (cf. p. 103).

Li, L. et C.W. Haggans. « Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 10.6 (1993), p. 1184–1189 (cf. p. 97, 105).

Liu, H. et P. Lalanne. « Microscopic theory of the extraordinary optical transmission ». Dans : *Nature* 452.7188 (2008), p. 728–731 (cf. p. 47, 51).

Marquier, F., JJ Greffet, S. Collin, F. Pardo et JL Pelouard. « Resonant transmission through a metallic film due to coupled modes ». Dans : *Opt. Express* 13.1 (2005), p. 70–76 (cf. p. 68).

Miyazaki, H.T. et Y. Kurokawa. « How can a resonant nanogap enhance optical fields by many orders of magnitude? » Dans : *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of* 14.6 (2008), p. 1565–1576. issn : 1077-260X (cf. p. 49).

Moore, E.H. « On the reciprocal of the general algebraic matrix ». Dans : *Bull. Amer. Math. Soc* 26 (1920), p. 394–395 (cf. p. 120).

Otto, A. « Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection ». Dans : *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 216.4 (1968), p. 398–410. issn : 0939-7922 (cf. p. 16).

Palik, E.D. et G. Ghosh. *Handbook of optical constants of solids.* Academic press, 1985 (cf. p. 82, 88, 110).

Pendry, JB, L. Martin-Moreno et FJ Garcia-Vidal. « Mimicking surface plasmons with structured surfaces ». Dans : *Science* 305.5685 (2004), p. 847. issn : 0036-8075 (cf. p. 32, 59).

Penrose, R. « A generalized inverse for matrices ». Dans : *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society.* T. 51. 03. Cambridge Univ Press. 1955, p. 406–413 (cf. p. 120).

Pines, D. « Collective energy losses in solids ». Dans : *Reviews of Modern Physics* 28.3 (1956), p. 184–198. issn : 1539-0756 (cf. p. 8).

Pines, D. et D. Bohm. « A collective description of electron interactions: II. Collective vs individual particle aspects of the interactions ». Dans : *Physical Review* 85.2 (1952), p. 338 (cf. p. 8).

Popov, E., S. Enoch et N. Bonod. « Absorption of light by extremely shallow metallic gratings: metamaterial behavior ». Dans : *Optics Express* 17.8 (2009), p. 6770–6781 (cf. p. 31).

Porto, JA, FJ Garcia-Vidal et JB Pendry. « Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits ». Dans : *Physical Review Letters* 83.14 (1999), p. 2845–2848 (cf. p. 68, 110).

Quarteroni, A., R. Sacco et F. Saleri. *Numerical mathematics.* Springer Verlag, 2007. isbn : 3540346589 (cf. p. 115).

Rayleigh, L. « On the dynamical theory of gratings ». Dans : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 79.532 (1907), p. 399–416. issn : 0950-1207 (cf. p. 20).

Ritchie, RH. « Plasma losses by fast electrons in thin films ». Dans : *Physical Review* 106.5 (1957), p. 874–881. issn : 0031-899X (cf. p. 8, 21).

Saad, Y. *Numerical methods for large eigenvalue problems.* Manchester Univ Pr, 1992. isbn : 0719033861 (cf. p. 98, 115).

Schoenberg, IJ. « Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions. Part A: On the problem of smoothing or graduation. A first class of analytic approximation formulae. Part B: On the problem of osculatory interpolation. A second class of analytic approximation formulae. » Dans : *Quart. Appl. Math.* 4 (1946), p. 45–99,112–141 (cf. p. 97).

Shalaev, V.M. « Optical negative-index metamaterials ». Dans : *Nature photonics* 1.1 (2007), p. 41–48 (cf. p. 32).

Shen, J.T., P.B. Catrysse et S. Fan. « Mechanism for designing metallic metamaterials with a high index of refraction ». Dans : *Physical review letters* 94.19 (2005), p. 197401. issn : 1079-7114 (cf. p. 2, 3, 32, 57).

Skigin, D.C. et R.A. Depine. « Transmission resonances of metallic compound gratings with subwavelength slits ». Dans : *Physical review letters* 95.21 (2005), p. 217402 (cf. p. 27, 76, 118).

Stavrinou, PN et L. Solymar. « The propagation of electromagnetic power through subwavelength slits in a metallic grating ». Dans : *Optics communications* 206.4-6 (2002), p. 217–223. issn : 0030-4018 (cf. p. 47, 49).

Taflove, A. et K.R. Umashankar. « The finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interactions ». Dans : *Electromagnetics* 10.1 (1990), p. 105–126 (cf. p. 97).

Teperik, TV, F.J.G. De Abajo, AG Borisov, M. Abdelsalam, PN Bartlett, Y. Sugawara et JJ Baumberg. « Omnidirectional absorption in nanostructured metal surfaces ». Dans : *Nature Photonics* 2.5 (2008), p. 299–301. issn : 1749-4885 (cf. p. 54).

Vassant, S. « Contrôle optique et électrique de réflectivité THz assisté par phonon-polaritons de surface. » Thèse de doct. 2011 (cf. p. 147).

Veronis, G., R.W. Dutton et S. Fan. « Method for sensitivity analysis of photonic crystal devices ». Dans : *Optics letters* 29.19 (2004), p. 2288–2290. issn : 1539-4794 (cf. p. 113).

Verslegers, L., P.B. Catrysse, Z. Yu et S. Fan. « Deep-subwavelength focusing and steering of light in an aperiodic metallic waveguide array ». Dans : *Physical Review Letters* 103.3 (2009), p. 033902 (cf. p. 120).

Verslegers, L., P.B. Catrysse, Z. Yu, J.S. White, E.S. Barnard, M.L. Brongersma et S. Fan. « Planar lenses based on nanoscale slit arrays in a metallic film ». Dans : *Nano letters* 9.1 (2008), p. 235–238 (cf. p. 34, 120).

Verslegers, L., P.B. Catrysse, Z. Yu et S. Fan. « Planar metallic nanoscale slit lenses for angle compensation ». Dans : *Applied Physics Letters* 95 (2009), p. 071112 (cf. p. 120).

Vincent, G. « Réseaux métalliques sub-longueur d'onde, applications á l'optique infrarouge. » Thèse de doct. 2008 (cf. p. 125, 126, 128).

Vincent, G., S. Collin, N. Bardou, J.L. Pelouard et R. Haïdar. « Large-area dielectric and metallic freestanding gratings for midinfrared optical filtering applications ». Dans : *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 26 (2008), p. 1852 (cf. p. 110).

Wei, X., A.J. Wachters et H.P. Urbach. « Finite-element model for three-dimensional optical scattering problems ». Dans : *Journal of the Optical Society of America A* 24.3 (2007), p. 866–881 (cf. p. 97).

Wood, RW. « XLII. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum ». Dans : *Philosophical Magazine Series 6* 4.21 (1902), p. 396–402. issn : 1941-5982 (cf. p. 8, 19).

Yang, XY, HT Liu et P. Lalanne. « Cross conversion between surface plasmon polaritons and quasicylindrical waves ». Dans : *Physical review letters* 102.15 (2009), p. 153903. issn : 1079-7114 (cf. p. 47, 51).

Yee, K. « Numerical solution of inital boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media ». Dans : *IEEE Transactions on antennas and propagation* 14.3 (1966), p. 302–307 (cf. p. 97).

Ingénierie d'indice optique à base de nanostructures métalliques

Résumé

Les nanostructures métalliques sont le siège de résonances plasmoniques qui permettent de confiner le champ électromagnétique et de contrôler la lumière à une échelle très sub-longueur d'onde. Les travaux de cette thèse portent en premier lieu sur la conception de structures plasmoniques agissant en absorption. Dans cette thèse, j'ai dimensionné, fabriqué et caractérisé des résonateurs métal / isolant / métal verticaux (sillons à grand rapport d'aspect) qui présentent une absorption totale dans l'infrarouge. Par ailleurs, j'ai étudié le couplage fort dans ces résonateurs qui mène à de très grands facteurs de qualité. Je montre qu'on peut également coupler plusieurs résonateurs pour faire du tri de photons et de l'absorption large bande. D'autre part, les systèmes plasmoniques deviennent plus complexes, et leur dimensionnement rapide passe par une réduction du temps de calcul. J'ai développé une méthode modale basée sur les B-splines qui permet, grâce à l'utilisation de matrices creuses, d'accélérer les calculs. De telles méthodes peuvent être utilisées conjointement avec un algorithme métaheuristique pour dimensionner des fonctions optiques, par exemple un absorbant large bande ou un filtre passe bande.

Engineering of optical index based on metallic nanostructures

Abstract

Plasmonic nanostructures are supporting plasmonic resonances which allow to confine the electromagnetic field and to govern the light behavior at a subwavelength scale. This thesis first deals with absorbing plasmonic structures. I have simulated, fabricated and characterized vertical metal / insulator / metal resonators (high aspect ratio grooves) which exhibit a total absorption in the infrared range. Besides, I have study the strong coupling regime in these resonators which led to very high quality factor. I show that it is also possible to couple several resonators to achieve photon sorting or widening of the absorption band. Furthermore, plasmonic devices are getting more and more complex, and their fast design can be achieved through a reduction of the computation time. I developed a modal method based on B-splines which allows, thanks to sparse matrices, to hasten the computations. Such methods can be used with a metaheuristic algorithm for the design of optical functions, *e.g.* a wide band absorber or a bandpass filter