MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

THESE DE DOCTORAT
Spécialité : PHYSIQUE
Option : Physique des matériaux

Présentée par :
Samira AMOUDACHE

Sujet :

Cristaux phoxoniques accordables ; application au domaine des capteurs

Devant le jury d'examen composé de :

Slimane HELLAL	Professeur UMMTO	Président
Rachid TIGRINE	Professeur U. Adrar	Rapporteur
Antoine KHATER	Professeur U. Maine, France	Co-rapporteur
Djamel BRADAI	Professeur USTHB	Examinateur
Boualem BOURAHLA	Professeur UMMTO	Examinateur
Yan PENNEC	Professeur U. Lille1, France	Invité

Soutenue le 26/11/2015

A la mémoire de mon père

et de ma sœur Ghenima

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie) en collaboration avec l'institut des molécules et matériaux de l'université du Maine (France), et l'institut d'électronique, de microélectronique et de nanotechnologie de l'université Lille1 (France), sous la direction scientifique des professeurs Rachid Tigrine, Antoine Khater et Yan Pennec.

Mes vifs et sincères remerciements vont à Monsieur Antoine Khater, professeur à l'université du Maine, pour m'avoir confié ce travail et pour la confiance qu'il m'a accordée depuis quelques années déjà lors des stages effectués sous sa responsabilité. Durant ces années écoulées il a su guider et encadrer mon travail avec le plus grand intérêt. Je voudrai lui exprimer ma gratitude pour la rigueur scientifique dont il a toujours fait preuve ainsi que pour ses qualités humaines indéniables.

Je tiens à remercier vivement Monsieur Rachid Tigrine, professeur à l'université d'Adrar, qui a dirigé mon travail avec beaucoup de compétences et de patience. Je souhaite le remercier pour ses conseils, son soutien constant ainsi que sa disponibilité tout au long de ce travail. Ses qualités humaines et ses remarques m'ont été précieuses et m'ont beaucoup aidé à la réalisation de ce travail.

Je tiens à exprimer ma grande reconnaissance à Monsieur Yan Pennec, professeur à l'université Lille1, qui m'a accueilli au sein de son équipe, pour les excellentes conditions de travail dont j'ai bénéficié tout au long de mon séjour. Je le remercie d'avoir accepté de diriger ce travail et pour l'avoir fait avec autant d'enthousiasme, avec beaucoup de compétences, d'intérêt et de disponibilité et enfin pour ses qualités humaines incontestables.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur Slimane Hellal, Professeur à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou pour l'honneur qu'il me fait de présider le jury de cette thèse.

Je tiens à exprimer à Monsieur Djamel Bradai Professeur à l'université des sciences et de la technologie Houari Boumediene et à Monsieur Boualem Bourahla Professeur à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou toute ma reconnaissance pour l'honneur qu'ils m'ont fait d'avoir accepté de juger ce travail.

Je voudrai remercier tous les membres de l'équipe EPHONI de l'université Lille1 en particulier Bahram djafari-Rouhani de m'avoir accueillie au sein de son équipe ainsi que Abdelatif Akjouj pour les discussions que j'ai eu avec lui. Je remercie également l'ensemble du personnel de l'UFR de physique et de L'IEMN de l'université Lille1 pour leurs services et leurs sympathies.

Je remercie l'ensemble des membres du LPCQ en particulier les membres de l'équipe excitations magnétiques et vibrationnelles des systèmes de basse dimensionnalité. Que l'ensemble du personnel du département de physique et de la faculté des Sciences trouve ici l'expression de mes remerciements.

Je remercie le Ministère Algérien de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique pour m'avoir octroyé une bourse PNE de 18 mois.

Je tiens à remercier tous mes ami(es) et toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Je témoigne enfin ma reconnaissance la plus sincère à ma famille, ma mère, mon frère, mes sœurs, ma nièce Anaïs, mes neveux Mourad, Meziane, Elias, Yacine Ali, ma belle sœur, mes beaux frères pour la confiance et le soutien dont ils ont fait preuve tout au long de ce travail.

SOMMAIRE

Introduction générale

Les cristaux photoniques [1,2] et leurs homologues acoustiques [3,4] sont des matériaux composites constitués d'assemblages périodiques d'inclusions dans une matrice. Ils sont maintenant bien connus pour leur capacité à orienter, contrôler et manipuler la propagation des ondes optiques et acoustiques. Leurs propriétés sont principalement liées à l'existence de bandes interdites qui empêchent la propagation des ondes quelle que soit la direction de l'onde incidente. Ces bandes interdites sont utilisées pour créer des modes localisés qui confinent l'énergie optique et acoustique. Les études sur les cristaux périodiques ont été en constant développement depuis les années 80 pour les cristaux photoniques et les années 90 pour les cristaux phononiques. Au cours de ces dernières années, il y a eu un intérêt croissant vers des structures présentant des bandes interdites à la fois phononique et photonique. Ces structures ont été introduites sous le nom de cristaux phoXoniques, le 'X' symbolisant la réunion des concepts de la photonique et de la phononique. C'est en 2006 que Maldovan et Thomas [5] ont démontré un tel comportement dans une structure 2D infinie formée d'un réseau carré et hexagonal de trous dans un substrat en silicium. Ces cristaux phoxoniques permettent le contrôle simultanément de la propagation et du confinement des photons et des phonons.

Compte tenu de l'attrait des cristaux photoniques et phononiques pour leur capacité d'empêcher et d'orienter la propagation des ondes, récemment ces structures ont trouvé une application prometteuse basée sur les capteurs sensibles à la détection des fluides chimiques et biochimiques. En effet ces dernières années, la demande en méthodes de détection d'espèces chimiques et de mesure de concentration a considérablement augmenté. Cet intérêt est essentiellement dû aux considérations environnementales, de sécurité, de contrôle de procédé ou de diagnostic médical. En général, la détection et le dosage d'espèces chimiques ou biochimiques sont faits à l'aide de différents types d'appareils de mesure comme des spectromètres ou des chromatographes. Cependant, ces instruments présentent plusieurs inconvénients: volumineux, coûteux, complexes, difficiles et longs à mettre en œuvre. C'est dans ce contexte que le développement de capteurs miniaturisés, biocompatibles, avec une réponse en temps réel et plus simple d'utilisation, est apparu comme une priorité. Parmi les

bio-capteurs actuels, ceux qui exploitent une détection optique présentent une sensibilité particulièrement élevée. Pour cette raison, plusieurs papiers ont déjà montré la capacité des cristaux photoniques et des structures plasmoniques pour détecter de petites variations de l'indice de réfraction des gaz et des liquides. Ils ont ouvert la voie à une plate-forme pour une nouvelle classe de capteurs. Les phénomènes de détection sont basés sur la haute sensibilité des modes localisés qui apparaissent dans les spectres de transmission à travers les cristaux photoniques vis-à-vis de la variation de l'indice de réfraction de l'analyte. Des capteurs à base de cristaux photoniques à microcavités bidimensionnelles [6-7] ont démontré à la fois théoriquement et expérimentalement leurs aptitudes dans la détection des éléments biochimiques. La détection est basée sur la haute sensibilité des modes localisés (associés aux défauts) qui apparaissent à l'intérieur des bandes interdites des cristaux photoniques. D'autres auteurs [8-9] ont également étudié la transmission normale à travers une plaque perforée périodiquement de trous avec la mesure du décalage fréquentiel d'une transmission spécifique dans le spectre de transmission en fonction de l'indice de réfraction du liquide. En revanche, les cristaux phononiques ont seulement récemment été proposés comme plate-forme possible pour détecter la vitesse acoustique d'un liquide remplissant les parties creuses de la structure [10-11]. La validation de principe a été démontrée par R. Lucklum et J. Li en 2009 [10] à partir d'une structure multicouche à une dimension constituée d'aluminium et d'eau. Peu après, les mêmes auteurs ont étudié le cas d'un cristal phononique à deux dimensions constitué de trous d'eau dans une matrice d'aluminium ou de tungstène. Récemment, M. Ke et al. [12] ont étudié expérimentalement et théoriquement, la transmission acoustique à travers un cristal phononique formé d'une plaque avec une application à la détection des liquides.

L'objectif de ce travail de thèse est d'étudier de nouvelles structures artificielles périodiques permettant de détecter à la fois les propriétés optiques et acoustiques des liquides. Nous proposons un double cristal phononique et photonique pour détecter simultanément les vitesses de la lumière et du son dans les liquides. De fait, notre étude porte sur des cristaux phoxoniques, matériaux périodiques qui présentent dans une même structure les propriétés fondamentales des cristaux photoniques et phononiques. Notre but est de mettre l'accent sur la potentialité de ces structures à présenter un caractère physique sensible à la détection de liquides bio-chimiques. Le travail de thèse porte sur l'étude de nouveaux capteurs ultra-sensibles accordables à base de cristaux phoxoniques mixte contenant un solide et un fluide. La démarche originale est de considérer les conditions géométriques nécessaires pour qu'une même structure puisse présenter des propriétés fondamentales à la fois aux ondes optiques et acoustiques. L'objectif est d'améliorer les structures pour une optimisation du facteur de

qualité et de la sensibilité du capteur aux ondes acoustiques et optiques prises séparément. Dans un premier temps il s'agit d'étudier indépendamment le comportement de ces structures vis-à-vis des ondes acoustiques et optiques. Nous modéliserons les structures les plus adaptées pour confiner et propager simultanément les photons et les phonons. Par la suite nous étendrons l'étude aux capteurs dits phoxoniques, dont les dimensions géométriques sont accessibles aux phonons et aux photons simultanément. L'accent sera mis sur des capteurs ultra-sensibles accordables à base de ces cristaux phoxoniques permettant la caractérisation des indices de réfraction et des vitesses acoustiques de différents milieux. De ce fait, la thèse apporterait ainsi, dans le contexte actuel du thème des capteurs phoxoniques en plein essor, des informations inédites sur un problème d'intérêt sociétal et d'actualité. Ce travail théorique repose sur des outils de simulations numériques performants développés depuis plusieurs années dans l'équipe EPHONI de l'IEMN de l'Université de Lille.

Cette thèse est structurée en quatre chapitres :

Le premier chapitre est consacré à une introduction aux cristaux phoxoniques et leurs applications. Un rappel sur les milieux périodiques photoniques et phononiques ainsi que leurs différentes applications sera présenté. Par la suite nous définirons les cristaux phoxoniques et nous présenterons les travaux antérieurs réalisés sur le calcul des structures de bandes phoxoniques de la littérature. Enfin, nous aborderons en détail le concept des capteurs en faisant un état de l'art de leur résultat dans les domaines photonique et phononique.

Dans le deuxième chapitre, nous expliquerons la méthode de calcul, à savoir la méthode des différences finies en espace et en temps, la FDTD (Finite Difference Time Domain). Cette technique de résolution des équations de Maxwell pour la propagation des ondes électromagnétiques a fait ses preuves dans l'étude des cristaux photoniques. Elle permet de calculer, pour des structures périodiques à une, deux ou trois dimensions, des courbes de dispersion, des coefficients de transmission et des cartographies de champ. Son principe consiste à discrétiser dans le domaine spatial comme temporel les équations de Maxwell décrivant la propagation d'une onde électromagnétique. Cette méthode permet également l'étude de la propagation des ondes acoustiques à travers les cristaux phononiques en discrétisant les équations d'élasticité dans le domaine temporel et spatial.

Dans le troisième chapitre, nous nous intéresserons à l'étude d'une structure phoxonique à deux dimensions constituée d'un substrat en silicium percée d'inclusions remplies d'air, dans laquelle une rangée de trous est remplie d'un liquide dont on veut sonder la vitesse acoustique et la vitesse de la lumière. Les conditions géométriques de la cavité sont étudiées dans le but d'optimiser la sensibilité du capteur phoxonique à la fois aux ondes acoustique et optique.

Nous avons ainsi montré comment cette structure périodique permettait d'accéder aux propriétés optiques (indice de réfraction) et acoustiques (vitesse longitudinale de l'onde) d'un liquide que l'on cherche à identifier, avec pour application la mise au point d'un capteur phoxonique.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude d'une structure à trois dimensions se basant sur la transmission perpendiculaire à une plaque de silicium perforée périodiquement de trous et plongée dans le liquide à analyser. Nous avons montré l'existence de pics et de zéros dans les spectres de transmission des ondes acoustiques et optiques et nous avons étudié leur évolution en fonction des paramètres géométriques. La sensibilité de ces modes a été étudiée en fonction de la vitesse du son et de l'indice de réfraction du milieu liquide.

En conclusion générale de ce travail, l'ensemble des résultats obtenus sera résumé et quelques perspectives seront données.

Bibliographie :

[1] E. Yablonovitch, *Photonic band-gap structures*, J. Opt. Soc. Am. B 10, 283 (1993).

[2] J. Joannopoulos and J. Winn, *Photonic crystal: molding the flow of light*, 2nd ed.; Princeton University Press: Princeton, NJ, USA, 2008.

[3] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, *Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites*, Phys. Rev. Lett. 71, 2022 (1993).

[4] E. N. Economou, M. Sigalas, *Stop bands for elastic waves in periodic composite materials*, J. Acous. Soc. Am. 95, 1734 (1994).

[5] M. Maldovan and E. L. Thomas, *Simultaneous complete elastic and electromagnetic band gaps in periodic structures*, Appl. Phys. B 83, 595 (2006).

[6] H. Kurt and D. S. Citrin, *Photonic crystals for biochemical sensing in the terahertz region*, Appl. Phys. Lett. 87, 041108 (2005).

[7] X. Wang, Z. Xu, N. Lu, J. Zhu, and G. Jin, *Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure*, Opt. Commun 281, 1725 (2008).

[8] W. Suh, M. F. Yanik, O. Solgaard and S. Fan, *Displacement-sensitive photonic crystal structures based on guided resonance in photonic crystal slabs*, Appl. Phys. Lett. 82, 1999 (2003).

[9] W. Suh, O. Solgaard and S. Fan, *Displacement sensing using evanescent tunneling between guided resonances in photonic crystal slabs*, J. Appl. Phys. 98, 033102 (2005).

[10] R. Lucklum and J. Li, Meas. *Phononic crystals for liquid sensor applications*, Sci. Tech. 20, 124014 (2009).

[11] R. Lucklum, M. Ke and M. Zubtsov, *Two-dimensional phononic crystal sensor based on a cavity mode, Sensors Actuators* B 271, 171 (2012).

[12] M. Ke, M. Zubtsov, and R. Lucklum, *Sub-wavelength phononic crystal liquid sensor*, J. Appl. Phys.110, 026101 (2011).

Chapitre 1

Les cristaux photoniques/phononiques et leurs applications

I- Introduction

La propagation des ondes dans des structures qui présentent des périodicités de l'ordre de grandeur de leurs longueurs d'ondes peuvent subir des effets dispersifs qui ne sont pas obtenus dans des matériaux conventionnels. Les cristaux photoniques sont des structures qui présentent des changements périodiques de leurs propriétés électromagnétiques (permittivité diélectrique). Ils peuvent, potentiellement, avoir des bandes interdites photoniques, interdisant la propagation des ondes électromagnétiques quelques soient la direction de l'onde incidente [1]. Les bandes interdites peuvent être employées pour guider, piéger ou encore confiner l'énergie optique dans de petits volumes. Ces propriétés ont permis de réaliser des dispositifs compacts, tels que les guides d'ondes dans des cristaux photoniques [2], les résonateurs [3], les multiplexeurs et démultiplexeurs [4]. Les cristaux photoniques (CPs) constituent une plateforme de choix pour le contrôle ultime de la lumière dans les domaines spatiaux et temporels, notamment pour des applications de détection et ce grâce à la micro-structuration périodique du matériau qui permet de piéger les photons et de créer des résonances optiques très sensibles à la présence des molécules à détecter [5-8]. De même, des bandes interdites phononiques [9] sont des matériaux qui présentent une périodicité de leurs propriétés élastiques (densité, coefficients élastiques) et présentent des domaines de fréquences dans lesquels les ondes élastiques ne peuvent pas se propager. Par analogie aux cristaux photoniques, les cristaux phononiques peuvent être employés pour confiner efficacement l'énergie élastique (ou acoustique) et permettre la réalisation de dispositifs phononiques. Les études des cristaux phononiques mènent à des applications telles que le guidage, le filtrage [10-12] ou le démultiplexage des ondes élastiques [13-15]. Récemment, comme leurs homologues photoniques, les cristaux phononiques ont été utilisés dans le domaine de détection [16,17]. Après les récents progrès dans le domaine des nanotechnologies, le contrôle simultané des phonons et des photons dans une même structure, avec le but de renforcer leur interaction, a reçu beaucoup d'attention au cours des quelques dernières années. Les structures submicroniques qui présentent à la fois les propriétés des cristaux phononiques et photoniques (dites structures phoxoniques) sont particulièrement prometteuses dans le confinement simultanés et l'interaction du son et de la lumière [18-20], avec des applications potentielles dans les dispositifs acousto-optiques [21-23]. Nous présentons dans ce qui suit une nouvelle application des cristaux phoxoniques comme capteurs permettant la détection de liquide [24]. Ce premier chapitre est consacré à une synthèse bibliographique des études sur les cristaux phoxoniques. Cet état de l'art revient sur les concepts nécessaires à l'appréhension des

matériaux à bandes interdites optiques et élastiques. Par la suite, dans la deuxième partie, nous présenterons les travaux réalisés sur le calcul des structures de bandes phoxoniques étudiées dans la littérature, avant de s'attarder plus en détail dans la troisième partie sur les capteurs à bases de cristaux photoniques et phononiques. Enfin, la dernière partie du chapitre est consacrée à la définition d'un capteur phoxonique ainsi que ses différentes caractéristiques.

II- Généralités sur les milieux périodiques

L'étude de la propagation des ondes de façon générale et dans les milieux périodiques en particulier ont constitué une période particulièrement bénéfique et propice entre la fin du 19ème siècle et le début du 20ème. Historiquement la propagation des ondes dans un milieu périodique fut étudiée en premier par Lord Rayleigh en 1887 grâce à son intérêt pour des cristaux minéraux. En 1915, c'est la cristallographie avec William Lawrence Bragg qui a observé des pics étroits en étudiant la diffraction des rayons X par un cristal. Il a développé le miroir de Bragg qui est une succession de surfaces planes transparentes d'indices de réfraction différents. Il permet de réfléchir, grâce à des phénomènes d'interférences constructives, 99.5% de l'énergie incidente. Les structures périodiques ont pour point commun leur capacité à inhiber la propagation des ondes en leur sein dans une certaine gamme de longueurs d'ondes. La physique de l'état solide a su, initialement, tirer pleinement profit de ces bandes interdites dans les cristaux, qui deviendront un élément clef dans l'étude et la conception des matériaux semi-conducteurs. Il a pourtant fallu attendre la fin des années 80 pour réellement voir émerger une extension de la notion de bande interdite aux ondes électromagnétiques et ainsi assister à la naissance des cristaux photoniques, des structures périodiques bidimensionnelles ou tridimensionnelles constituées de deux ou trois matériaux présentant des propriétés diélectriques distinctes. Il a en revanche, fallu moins d'une décennie pour assister à une transposition de la plupart de ces mêmes phénomènes à l'acoustique. Ils consistent également à mettre à profit les phénomènes de diffusion et de diffraction se produisant dans un matériau composite périodique pour inhiber la propagation des ondes acoustiques dans toutes les directions de l'espace.

Les structures périodiques peuvent être classifiées selon leurs directions de périodicité. Ainsi, il existe des milieux périodiques qui présentent une périodicité de leurs propriétés physiques selon une, deux ou trois dimensions comme illustré par la figure 1. D'un point de vue pratique, les structures à une dimension (1D) sont constituées de couches empilées les unes sur les autres suivant une alternance périodique de deux matériaux (figure 1a). Les structures

présentant une périodicité suivant deux dimensions sont caractérisées par des motifs périodiques dans un plan et sont considérés invariants et illimités selon la direction perpendiculaire au plan de la périodicité (figure 1b). Les structures sont composées généralement de réseaux de cylindres dans l'air ou de trous percés dans la matière. Quand l'épaisseur est finie (plaque ou membrane), on parle de structure quasi-2D. Enfin, les structures à trois dimensions (figure 1c) peuvent être produites concrètement par des sphères empilées les unes sur les autres ou des arrangements périodiques de cylindres selon plusieurs directions.

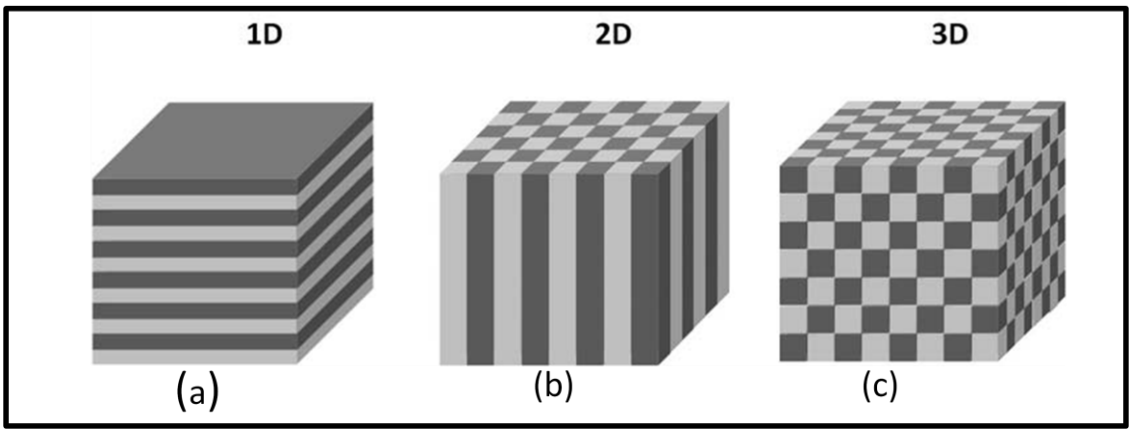


Figure 1 : Représentation schématique de cristaux périodiques photoniques ou phononiques unidimensionnel (1D : matériau multicouches), bidimensionnel (2D : Réseau de cylindres dans une matrice) et tridimensionnel (3D : Réseau de sphères dans une matrice) [25].

Analogie électron-photon-phonon

Il existe une analogie formelle entre l'électron dans un cristal au sens de la physique du solide (arrangement périodique de potentiels) et le photon dans un cristal photonique (arrangement périodique diélectrique) ou encore le phonon dans un cristal phononique (arrangement périodique de matériaux élastiques). En effet, des similitudes existent entre l'équation de Schrödinger, qui gouverne la fonction d'onde électronique, la relation tirée des équations de Maxwell qui régit le champ électromagnétique et la relation tirée des équations d'élasticité, qui régit les champs de déplacement. On peut ainsi assimiler la permittivité diélectrique $\varepsilon(r)$ de l'équation de Maxwell et la densité $\rho(r)$ de l'équation d'élasticité au potentiel $V(r)$ de la relation de Schrödinger. Kushwaha et al. [26] résument dans un tableau (voir tableau 1) les propriétés fondamentales régissant la propagation des ondes électroniques, électromagnétiques et élastiques dans les structures périodiques.

TABLE I. Band-structure-related properties of three periodic systems.

Property	"Electronic" crystal	"Photonic" crystal	"Phononic" crystal
Materials	Crystalline (natural or grown)	Constructed of two dielectric materials	Constructed of two elastic materials
Parameters	Universal constants, atomic numbers	Dielectric constants of constituents	Mass densities, sound speeds c_l, c_t of constituents
Lattice constant	1-5 Å (microscopic)	0.1 μm-1 cm (mesoscopic or macroscopic)	Mesoscopic or macroscopic
Waves	de Broglie (electrons) ψ	Electromagnetic or light (photons) **E**, **B**	Vibrational or sound (phonons) **u**
Polarization	Spin ↑,↓	Transverse: $\nabla\cdot\mathbf{D}=0$ ($\nabla\cdot\mathbf{E}\neq 0$)	Coupled trans.-longit. ($\nabla\cdot\mathbf{u}\neq 0, \nabla\times\mathbf{u}\neq 0$)
Differential equation	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\mathbf{r})\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$	$\nabla^2\mathbf{E}-\nabla(\nabla\cdot\mathbf{E})=\frac{\epsilon(\mathbf{r})}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}$	See Refs. [27,28]
Free particle limit	$W=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ (electrons)	$\omega=\frac{c}{\sqrt{\bar{\epsilon}}}k$ (photons)	$\omega=c_{t,l}k$ (phonons)
Band gap	Increases with crystal potential; no electron states	Increases with $\lvert\epsilon_a-\epsilon_b\rvert$; no photons, no light	Increases with $\lvert\rho_a-\rho_b\rvert$, etc. no vibration, no sound
Spectral region	Radio wave, microwave, optical, x ray	Microwave, optical	$\omega\lesssim 1$ GHz

Tableau 1: tableau récapitulatif des analogies et différences entre structures périodiques pour différents types d'onde, d'après la référence [26].

II-1 Les cristaux photoniques

La photonique a beaucoup à apprendre de la nature et en particulier des ailes de papillon. Le cyanophrys acaste est un papillon originaire du Brésil. On peut voir sur la figure 2a la couleur bleutée de ses ailes. Contrairement à ce que l'on pourrait croire, cette couleur n'est pas liée à un pigment quelconque mais à une structuration à l'échelle nanométrique comme l'on peut le voir sur la figure 2b. On distingue nettement en second plan, un réseau de trous disposés de manière approximativement hexagonale. Il est important de noter que la période spatiale de cette structure est de l'ordre de la fraction de la longueur d'onde (le bleu correspond à une longueur d'onde d'environ 400 nm). Ainsi les ailes de papillon se comportent comme un réseau de diffraction bidimensionnel, fortement réfléchissant dans le bleu. Dans ce domaine de longueur d'onde, toutes les ondes diffractées réfléchies par chacun des trous sont en phase et s'ajoutent de manière cohérente.

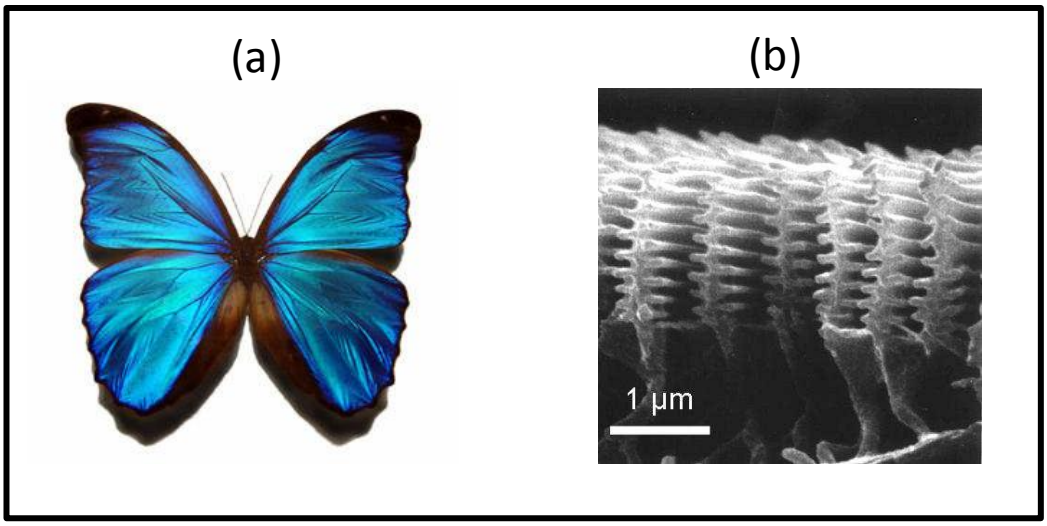


Figure 2 : Papillon cyanophrys acaste : (a) vue dorsale (b) image en microscopie électronique à balayage de l'aile, d'après les références [27,28].

C'est de cette approche que participent les cristaux photoniques. Il y a une vingtaine d'années environ, E. Yablonovith [29] et S. John [30] proposèrent d'utiliser des structures diélectriques périodiques pour structurer le rayonnement électromagnétique. En utilisant les concepts bien connus de la physique du solide, ils ont montré qu'une telle structure diélectrique était l'équivalent, pour le photon, d'un cristal pour l'électron. Dès lors, on pouvait s'attendre à l'apparition de bande de fréquences où la propagation des photons est interdite. Ce << cristal >> photonique se comporterait alors comme un réflecteur parfait dans la gamme de longueurs d'ondes correspondante. L'obtention de bandes interdites pour les ondes électromagnétiques est soumise à un nombre de conditions liées soit à la géométrie, soit aux matériaux constitutifs du système. De ce fait, Yablonovitch [31] a montré que le rapport d'indices minimum nécessaire à l'obtention d'une bande interdite pour les ondes électromagnétiques se situait aux alentours de 2. Depuis ces premiers résultats, les travaux sur les structures périodiques photoniques se sont multipliés, mettant en évidence d'autres propriétés dispersives remarquables, avec diverses applications dans les domaines de l'optique ondulatoire, l'électronique et l'optoélectronique [32-35]. Un des phénomènes les plus intéressants est d'introduire des défauts dans le cristal puisque des états localisés photoniques dont les formes et les propriétés sont régies par la nature du défaut, peuvent apparaître dans la bande interdite. Les caractéristiques de ces défauts ont été étudiées par plusieurs équipes [36,37]. Un défaut peut être créé dans un cristal photonique soit en insérant soit en enlevant du matériau diélectrique. Nous pouvons aussi modifier la dimension ou la forme des diélectriques par une modification locale d'indice ou un changement de taille d'un motif du cristal. Un défaut

ponctuel constitue une microcavité et un défaut continu constitue un guide d'onde. La présence d'un défaut ponctuel peut conduire à l'existence de niveaux discrets d'énergie dans une ou plusieurs bandes interdites à la fois. Les modes électromagnétiques introduits par le défaut sont appelés modes de défaut. Ce sont des modes localisés à l'intérieur ou proche du défaut et dont la fréquence peut se situer dans la bande interdite du cristal.

II-2 Les cristaux phononiques

Le contrôle de la propagation des ondes élastiques/acoustiques à l'échelle de la longueur d'onde, voire inférieure, est un problème fondamental qui peut présenter des applications dans de nombreux domaines technologiques comme celui du traitement de signal et du filtrage ou encore celui des capteurs. Aux grandes longueurs d'ondes, on peut citer les métamatériaux acoustiques et la réalisation de bouclier sonore, la focalisation des ondes et la super-résolution des images pour applications médicales. Les cristaux phononiques ont été proposés simultanément par deux équipes, l'une d'E. N. Economou et M. Sigalas 1992 [9] et l'autre de M. S. Kushwaha en 1993 [26]. Les cristaux phononiques sont des matériaux composites constitués d'une distribution périodique d'inclusions incorporées dans une matrice. Du fait de leur structure périodique, ces matériaux peuvent présenter, sous certaines conditions, des gaps acoustiques absolus, c'est-à-dire des bandes interdites quelque soit la direction de propagation de l'onde élastique incidente. Dans le domaine de fréquences du gap, une onde incidente sera réfléchie par le cristal phononique qui opère alors comme un miroir parfait non absorbant. Une telle propriété est prometteuse pour une variété importante d'applications, comme par exemple la réflexion des ondes sismiques, la création de boucliers acoustiques ou encore la construction de miroirs non absorbants permettant l'isolation phonique de cavités. Durant ces dernières décennies, la recherche sur les cristaux phononiques a connu une sérieuse avancée en particulier grâce au développement de méthodes de calcul théorique et d'outils numériques de simulation. L'existence de bandes interdites absolues a été prédite théoriquement [38] avant d'être démontrée expérimentalement dans une grande variété de cristaux phononiques constitués de composants solides [39] ou d'inclusions solides dans une matrice fluide [40]. Par analogie avec le travail effectué sur les cristaux photoniques, où un contraste important entre les indices de réfraction était nécessaire, il a été montré que, dans le cas des cristaux phononique, l'existence et la largeur des bandes interdites absolues dépendaient fortement de la nature des constituants, du contraste entre les paramètres physiques (densité et constantes élastiques) entre les inclusions et la matrice, de la géométrie du réseau d'inclusion, de la

forme des inclusions et du facteur de remplissage. Comme en photonique, l'introduction de défauts dans des cristaux phononiques permet de générer la création d'états localisés dans les bandes interdites [41,42]. Ces dispositifs sont obtenus en modifiant la structure périodique d'un cristal phononique par l'insertion de différentes variétés de défauts structurels. Une application majeure des cristaux phononiques porte sur la réalisation de guides d'ondes et de filtres fréquentiels sélectifs. Le défaut peut être linéaire, formant un guide droit [43], mais peut également présenter un coude avec un ou plusieurs angles droits [44]. Les guides linéaires, couplés à des cavités, conduisent à des propriétés de filtrages sélectifs [45-47].

III- Les cristaux phoxoniques

III-1 introduction

Comme définis précédemment, les cristaux photoniques sont des structures artificielles permettant de contrôler la propagation et le confinement de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde. De façon analogue, les cristaux phononiques ont été inventés pour contrôler et manipuler les ondes acoustiques. Récemment, il a été proposé d'imaginer, de modéliser et de fabriquer des structures artificielles dites phoxoniques, dans lesquelles il est possible de contrôler simultanément la propagation, le confinement et le guidage des photons et des phonons. Les applications de ces matériaux artificiels peuvent concerner l'interaction photons-phonons dans les cavités et les guides à modes lents. L'idée fondamentale derrière les cristaux photoniques (resp. phononiques) a été d'introduire la périodicité par rapport à l'indice de réfraction (resp. impédance acoustique) à une, deux ou trois dimensions. Les cristaux phoxoniques rassemblent les propriétés des cristaux photoniques et phononiques, le x dans le mot phoxonique désignant alternativement le t et le n. Prenons par exemple l'insertion d'un réseau périodique de trous dans une plaque constituée d'un matériau transparent. Dans le cristal phoxonique, il devient possible d'obtenir des intervalles d'énergie pour lesquels à la fois la lumière et le son ne peuvent se propager à l'intérieur du milieu. Il est alors envisagé de fabriquer des structures où la lumière et le son peuvent être confinés dans des volumes très petits permettant une exaltation de l'interaction entre la lumière et le son. Ce travail présente une application potentielle des cristaux phoxoniques basée sur les capteurs sensibles à la détection des fluides chimiques et biochimiques.

III-2 Structures de bandes et bandes interdites phoxoniques

L'étude des cristaux phoxoniques représente un domaine de recherche très récent. Ces cristaux revêtent une grande importance puisqu'ils permettent le confinement simultané d'une onde électromagnétique et d'une onde acoustique dans le même dispositif. La possibilité d'une interaction entre ces deux ondes de natures différentes a ouvert un nouveau champ d'étude : l'interaction acousto-optique dans les structures périodiques. L'idée novatrice des cristaux phoxoniques consiste à exploiter les phénomènes de confinement, de guidage et d'onde lente au profit du couplage acousto-optique. Les premières études concernant les cristaux phoxoniques se concentrent tout d'abord sur la possibilité théorique d'obtenir des bandes interdites acoustiques et optiques simultanées pour une même structure. Cette condition préliminaire est nécessaire à l'obtention de modes de cavité et au confinement simultané d'ondes optiques et acoustiques en vue du couplage acousto-optique entre ces modes de résonance. Introduire des défauts dans le cristal phoxonique fait apparaitre des états localisés photoniques et phononiques dont les formes et les propriétés sont régies par la nature du défaut. Nous étudions dans le troisième chapitre ces cristaux phoxoniques accordables, sensibles à la nature d'un liquide infiltrant la structure périodique. Cette infiltration peut se faire par l'introduction, au cœur du cristal, de trous cylindriques à l'intérieur desquels la nature du liquide peut être modifiée. L'utilisation de ces dispositifs en temps que capteurs biochimiques conduit à la connaissance des propriétés acoustiques et optiques du liquide d'infiltration.

III-2-1 Bandes interdites dans des structures phoxoniques bidimensionnelles

L'existence simultanée de bandes interdites photoniques et phononiques et l'interaction phonon-photon a été étudiée dans des structures multicouches unidimensionnelles [48, 49]. Récemment, Psarobas et al. [50], Papanikolaou et al. [51] ont étudié l'interaction acousto-optique théoriquement dans une cavité unidimensionnelle (1D) d'un cristal phoxonique constituée alternativement de couches de silicium/silice. Le choix des structures à 1D avec la périodicité dans la direction de la propagation est lié au potentiel élevé d'obtenir des gaps photoniques et phononiques larges et la possibilité d'insérer des cavités. En 2006, Maldovan et Thomas [18] ont rapporté que des bandes interdites à la fois photoniques et phononiques pouvaient être obtenues dans une structure périodique bidimensionnelle. Ces cristaux 2D sont

composés de trous d'air dans une matrice de silicium et organisés en réseau carré ou hexagonal. La figure 3 représente les structures de bande photonique (a, b) et phononique (c, d) en fonction du rayon réduit r/a, où r est le rayon des cylindres et a le paramètre du réseau. Les courbes sont représentées selon leurs fréquences réduites $\omega a / 2\pi c$ en photonique où c est la vitesse de la lumière dans le vide et $\omega a / 2\pi c_t$ en acoustique où c_t est la vitesse transverse du son dans le silicium.

Les cartes des bandes interdites photoniques (figure 3a et 3b) sont représentées en fonction des deux polarisations possibles, à savoir transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM). Notons qu'une bande interdite absolue (couleur verte), i.e. à la fois TE et TM, est possible pour les deux réseaux bien que le réseau hexagonal offre celle qui est la plus large. Pour la phononique (figure 3c et 3d), les cartes de bandes interdites sont dissociées pour les directions de polarisation des champs de déplacement dans le plan et hors plan. Ici encore, les deux réseaux présentent des bandes interdites totales (orange) pour les deux réseaux de trous, avec cependant une bande plus large pour le réseau carré. Ces matériaux composites peuvent donc contrôler à la fois la vitesse de la lumière et du son. Parallèlement, ils ont montré que ce recouvrement de bandes interdites n'était pas possible pour la situation inverse d'un réseau de cylindres en silicium dans l'air.

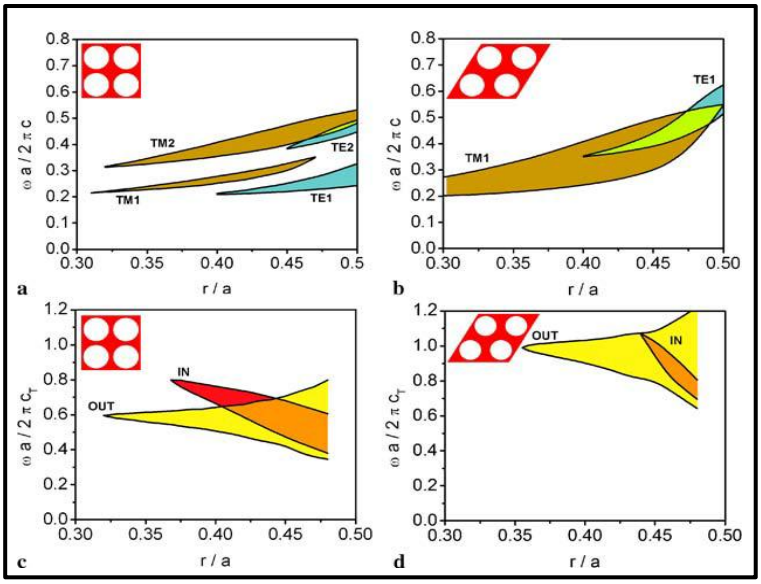


Figure 3: Bandes interdites photoniques (haut) et phononiques (bas) de cylindres d'air disposés selon un réseau carré (gauche) et triangulaire (droite) dans un matériau (diélectrique / élastique) en silicium. (a, b) Mise en évidence des bandes interdites photonique complète (vert) obtenues lorsque le gap de la polarisation TE (bleu) chevauche le gap de polarisation TM (marron). (c, d), Mise en évidence des bandes interdites phononiques (orange) obtenues lors du chevauchement des deux gaps des déplacement hors plan (jaune) et dans le plan (rouge) [18].

L'existence de bandes interdites complètes pour les ondes électromagnétiques et élastiques peut conduire à la localisation simultanée de la lumière et du son à l'intérieur des cavités. Un tel confinement peut avoir une forte influence sur les interactions photon-phonon. En utilisant la méthode des supercellules, Maldovan et al. [52] ont démontré l'existence de modes localisés en introduisant une cavité dans le cristal phoxonique, en remplissant de silicium un des trous d'air du réseau carré de cylindres. La figure 4 illustre les courbes obtenues en photonique pour la polarisation TE (figure 4b) et en phononique pour les déplacements dans le plan (figure 4c) et hors plan (figure 4d). Les évolutions des fréquences réduites des modes de cavité sont représentées à l'intérieur des bandes interdites en fonction du rayon réduit r/a des cylindres d'air.

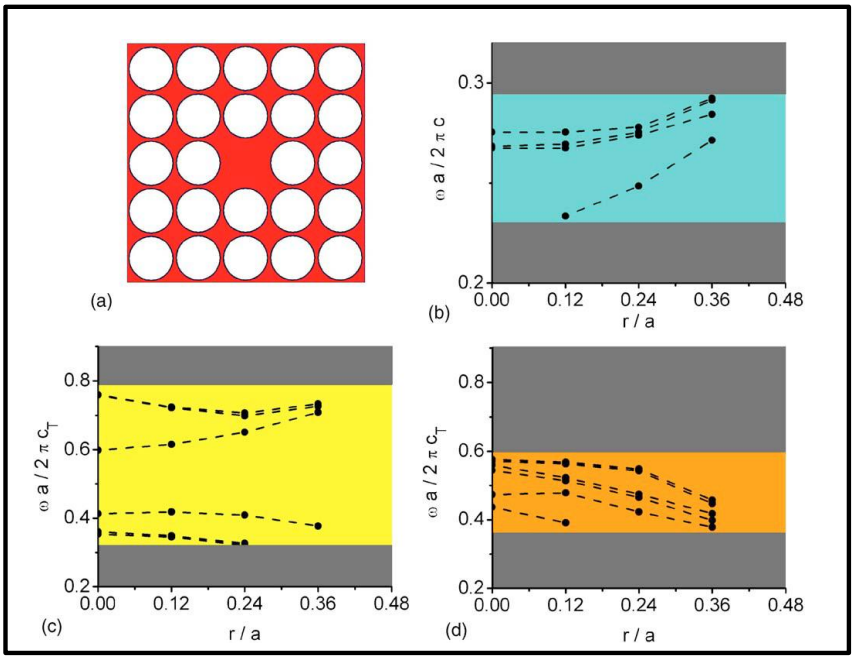


Figure 4 : (a) Cavité dans un réseau carré de cylindres d'air (r = 0.48a) dans une matrice en silicium. Evolution en fonction du rayon des trous des fréquences des modes de défauts photoniques TE (b) et phononiques dans le plan (c) et hors plan (d) [52].

Par ailleurs, la mise en évidence expérimentale d'un tel phénomène de bandes interdites a été rapportée dans un cristal phononique et photonique tridimensionnel des sphères amorphes de silice [53]. Sadat-Saleh et al. [54] ont démontré théoriquement la possibilité d'ouvrir des bandes interdites photoniques et phononiques dans des structures à 2D en niobate de lithium. Ce matériel piézoélectrique est fortement anisotrope élastiquement avec un indice de réfraction plus faible par rapport à celui du silicium. Dans ce travail, les structures de bandes photoniques et phononiques des cristaux à 2D fait de trous d'air cylindriques ont été calculées et comparées pour différentes géométries de réseaux. En particulier les géométries

hexagonales et carrées ainsi qu'en nid d'abeilles ont été considérés. En comparant avec les résultats de Maldovan et Thomas pour le silicium [18,52], ces auteurs ont constaté que les bandes interdites photoniques étaient plus faibles pour le niobate de lithium et que, en particulier, la largeur de la bande interdite photonique et phononique n'était généralement pas obtenue pour la même structure du réseau. Le meilleur compromis a été atteint en diminuant la symétrie de la structure périodique en considérant une symétrie hexagonale avec trois cylindres différents dans la cellule unité. Le faible indice de réfraction optique du matériau rend difficile l'obtention de bandes interdites phoxoniques complètes. Cependant le confinement simultané de l'énergie élastique et électromagnétique dans un même volume et à la même longueur d'onde demeure possible, à condition que la lumière incidente soit polarisée. En 2010, Bria et al. [55] ont démontré l'existence de bandes interdites phoxoniques absolues en utilisant le saphir comme support dans le domaine de micro-onde. Dans le même papier, pour le silicium dans la gamme de fréquences de télécommunications, ils ont démontré que des bandes interdites absolues photoniques et phononiques peuvent être obtenues en faisant une combinaison de deux cristaux ayant un facteur de remplissage légèrement différent. En termes d'applications potentielles liées à la structure à base de saphir, une des applications les plus prometteuses concerne la réalisation d'un capteur dans un environnement à haute température. En effet, le saphir peut résister à des conditions de températures extrêmes. Récemment T. X. Ma et al. [56] ont étudié théoriquement des bandes interdites complètes dans un cristal phoxonique à 2D en Silicium. Le réseau carré, triangulaire et en nid d'abeilles ont été considérés. Les auteurs ont présenté la variation des bandes interdites photoniques et phononiques en fonction de la géométrie et de la forme de la structure. Les résultats prouvent que de larges bandes photoniques et phononiques complètes simultanées peuvent exister sur un éventail de paramètres géométriques pour les réseaux carré et nid d'abeilles.

Les cristaux phoxoniques détiennent les promesses d'un confinement simultanée du son et de la lumière dans de très petits volumes, avec des applications potentielles pour des dispositifs acousto-optique et le contrôle des interactions phonon-photon. Au cours de ces deux dernières années l'interaction phonon-photon au sein de structures sub-microniques, où la propagation des photons et des phonons est simultanément contrôlée, a reçu beaucoup d'attention. Cette interaction pourrait être fortement renforcée en créant des cavités qui confinent à la fois les photons et les phonons, ou bien en créant des modes « lents » de photons et phonons qui interagissent pendant une longue période [57, 58].

III-2-2 Bandes interdites dans des structures phoxoniques membranaires

Les structures périodiques à 2D, constituées par une répétition périodique d'inclusions dans une matrice, ont ouvert de nouvelles voies pour le contrôle du son et de la lumière, menant à la proposition de beaucoup de dispositifs optiques [59] et acoustiques [60]. L'intérêt de ces structures est en partie basé sur leur capacité d'exhiber des bandes absolues et des modes localisés liés aux défauts formant des guides d'ondes et des cavités. L'existence de bande interdite et de modes confinés est particulièrement étudiée dans des plaques à cristaux photoniques [61,62] et plus récemment dans des plaques à cristaux phononiques, [63-65] en particulier en raison de la réalisation et de l'intégration technologique des structures intégrées pour l'électronique et les télécommunications. L'existence de deux bandes interdites photoniques et phononiques a été étudiée d'abord dans les cristaux 2D infinies de trous d'air percés dans le silicium, [18,52] niobate de lithium, [54] ou saphir, [55] comme nous venons de le décrire précédemment.

Durant les années 2010 et 2011, une activé soutenue concernant la recherche et l'étude des bandes interdites dans des plaques structurées périodiquement a été enregistrée. Les réseaux étudiés sont à deux dimensions et l'épaisseur finie de la membrane font appeler ces structures de dimension 2.5D. L'existence de bande interdite photonique et phononique a été étudiée dans des plaques en silicium à 2.5D avec des inclusions composées de trous, [66,67] de piliers, [19,68], ou de structures type flocon de neige [69]. Dans le cas des membranes, les différents paramètres géométriques ne se limitent plus aux rayons d'inclusions mais aussi à l'épaisseur de la membrane. De ce fait, l'existence des bandes interdites simultanées se réduit à un ensemble paramétrique optimal (h, r, a), où h est l'épaisseur de la membrane, r le rayon des inclusions et a le paramètre du réseau. De manière similaire aux études à 2D, les différents réseaux comme les réseaux carré, en nid d'abeille ou triangulaires présentent des bandes interdites différentes pour chaque configuration [67,70]. En particulier Pennec et al. [67,71] ont montré l'existence de bandes interdites à la fois phononiques et photoniques dans un cristal fini à 2 dimensions constitué d'un réseau périodique de trous dans une membrane de silicium. Ces auteurs ont étudié l'évolution des bandes interdites phononiques et photoniques en fonction du facteur de remplissage pour différentes épaisseurs. Ces travaux ont été effectués et leurs résultats ont été discutés en tenant compte de la symmétrie des modes par rapport au milieu de la plaque : les modes symétriques (pairs «even») et antisymétriques (impairs «odd») sont découplés. La figure 5 représente les résultats obtenus pour les réseaux carrés et nid d'abeille respectivement. Ces courbes montrent l'évolution des bandes interdites

photoniques et phononiques pour chaque symétrie (paire et impaire) en fonction du facteur de remplissage f (entre 0.3 et 0.7) et pour différentes valeurs de l'épaisseur de la membrane de silicium h_{Si}/a (entre 0.4 et 0.7). Les bandes interdites photoniques et phononiques correspondants aux modes symétriques et antisymétriques sont délimitées par des lignes rouges et bleues respectivement. Les surfaces grises indiquent les bandes interdites absolues.

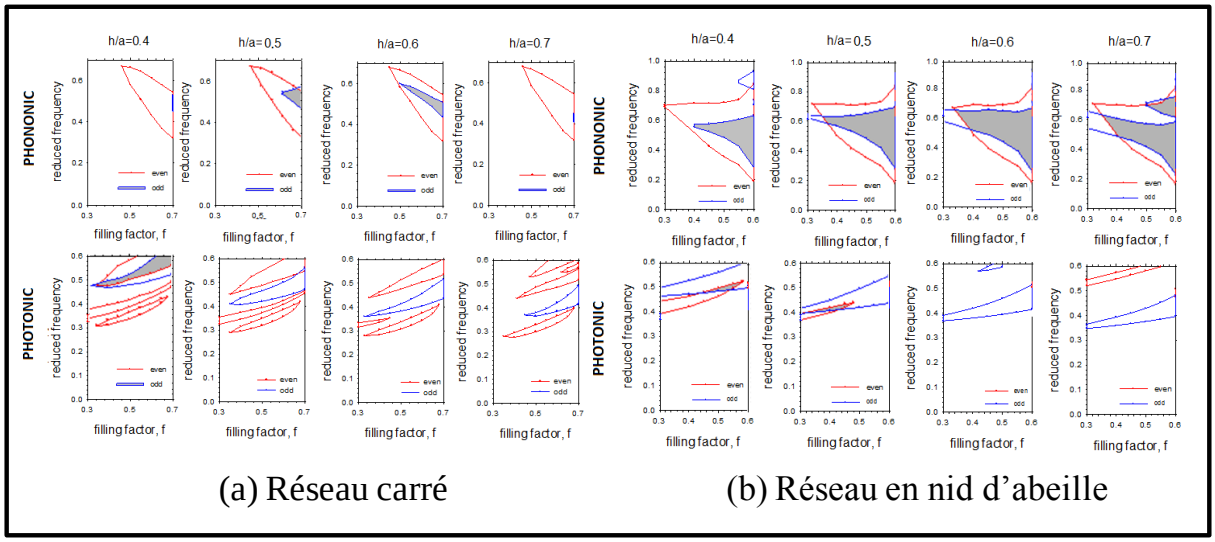


Figure 5 : Evolution des bandes interdites acoustiques (haut) et optiques (bas) pour les réseaux carrés (a) et nid d'abeille (b). Les courbes rouges et bleues représentent les polarisations symétriques (even) et antisymétriques (odd) par rapport au milieu de la plaque, les surfaces grises correspondent aux bandes interdites absolues, d'après les références [67, 71].

En phononique, ces résultats montrent que les bandes symétriques présentent peu de variation avec l'épaisseur de la membrane. Par contre les bandes antisymétriques varient fortement. En particulier, pour le réseau en nid d'abeille : les bandes s'élargissent au fur et à mesure que l'épaisseur augmente. On constate que le réseau en nid d'abeille présente des gaps plus larges que dans le cas du réseau carré tout en s'ouvrant à plus bas facteur de remplissage. Les gaps impairs sont, en général, inclus dans les gaps pairs exceptés à bas facteur de remplissage, délimitant ainsi les contours des bandes interdites absolues. Enfin, dans le cas du réseau carré, le gap absolu n'est ouvert que lorsque la hauteur est environ la moitié du paramètre de maille.

En optique, les bandes symétriques optiques sont plus nombreuses dans le réseau carré que dans le réseau nid d'abeille. Cependant dans le cadre du cristal photonique, le recouvrement des bandes des deux polarisations est faible. La limitation dans l'existence de gaps phoxoniques vient de la photonique. Ainsi, dans le cas du réseau nid d'abeille, le gap impair photonique existe sur la totalité de la gamme du facteur de remplissage étudiée et pour toutes les valeurs de h_{Si}/a alors que le gap pair n'existe même plus pour $h_{Si}/a > 0.6$. Néanmoins, une

bande interdite absolue à la fois en phononique et en photonique existe (régions grises dans la figure 5) configuration en nid d'abeille à condition de prendre une épaisseur de la membrane dans l'intervalle h_{Si}/a = [0.4-0.5]. Par contre pour le réseau carré les bandes interdites absolues photoniques et phononiques n'apparaissent pas pour les mêmes paramètres géométriques. Nous pouvons cependant définir plusieurs cristaux phoxoniques en limitant la symétrie des modes.

IV- Capteurs

IV-1 Introduction

Avec les progrès spectaculaires de la technologie, notamment en ce qui concerne la miniaturisation, la communication sans-fil et la puissance de calcul, les équipements informatiques deviennent de plus en plus petits, puissants et autonomes. Les capteurs, fruits de cette évolution technologique, ont déjà commencé, et continueront, à faire partie de notre environnement. En effet au cours de ces dernières années la détection d'espèces chimiques ou biologiques ainsi que l'évaluation de leurs quantités ou leurs concentrations représentent un enjeu de plus en plus important dans de nombreux domaines (environnemental, industriel, médical, militaire, biologique, sécurité alimentaire). Les analyseurs sont généralement des systèmes relativement complexes associant différents éléments mécaniques, chimiques et électriques. L'ensemble est souvent coûteux, encombrant et complexes, ce qui les rend peu aptes à des mesures sur sites. De plus, ces instruments sont souvent affligés d'un temps de réponse long soit par la technique de détection elle-même soit par la nécessité de manipulation des échantillons. C'est dans ce contexte que le développement de capteurs miniaturisés, biocompatibles, avec une réponse en temps réel et plus simple d'utilisation est apparu comme une priorité. Parmi ces capteurs sensibles citons les capteurs à base de cristaux photoniques et phononiques que nous allons présenter dans les paragraphes suivants.

IV-2 Définition d'un capteur

Un capteur est un dispositif transformant l'état d'une grandeur physique observée en une grandeur utilisable, telle qu'une tension électrique, une fréquence, une hauteur de mercure, une intensité ou la déviation d'une aiguille. On peut dire qu'un capteur est un dispositif qui, sous l'effet d'une grandeur physique que l'on souhaite connaitre et caractériser, délivre une grandeur physique exploitable on parle ainsi d'un transducteur (figure 6). Les grandeurs d'influence sont des grandeurs extérieures qui, selon leur nature et leur importance, peuvent

provoquer des perturbations sur le capteur. Parmi les principales grandeurs d'influence : la température, la pression, l'humidité, la concentration chimique,...

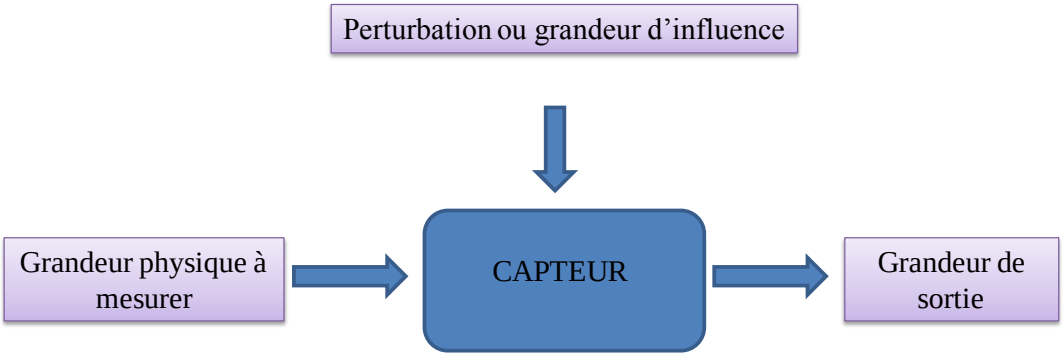


Figure 6 : Définition d'un capteur.

IV-2-1 Paramètres caractéristiques des capteurs

Il existe un certain nombre de caractères communs à tous les capteurs dont les plus courants sont :

a – Etalonnage : l'étalonnage permet d'ajuster et de déterminer sous forme graphique la relation entre la grandeur à mesurer (mesurande) et la grandeur de sortie (figure 7).

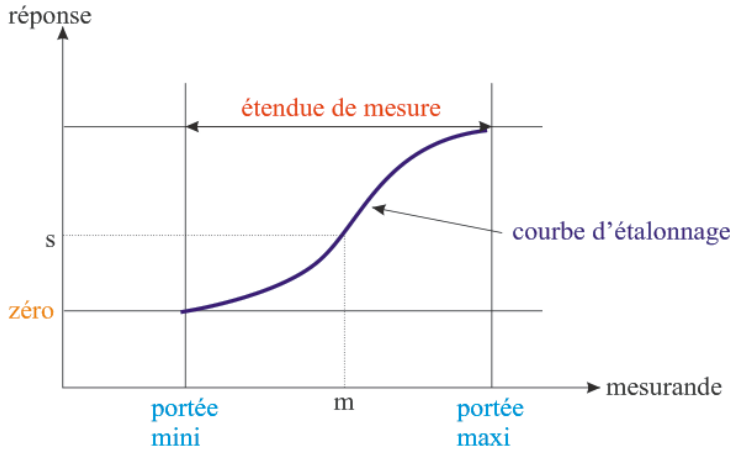


Figure 7: Courbe d'étalonnage d'un capteur.

b - Etendue de mesure (gamme de mesure) : c'est le domaine de variation possible de la grandeur à mesurer. Elle est définie par une valeur minimale et une valeur maximale. Ces deux valeurs extrêmes s'appellent la portée minimale et la portée maximale (voir figure 7).

c - Résolution : la résolution d'un capteur est la plus petite variation de la grandeur mesurée qui produit une variation perceptible de l'indication délivrée.

d - Sensibilité : la sensibilité est un paramètre exprimant la variation du signal de sortie en fonction de la variation de la mesurande.

e - Linéarité : un capteur est dit linéaire s'il présente la même sensibilité sur toute l'étendue de sa plage d'emploi.

f - Limite de détection : c'est la plus petite valeur de la grandeur à mesurer pouvant être détectée.

IV-3 Capteurs photoniques

IV-3-1 Introduction

Les deux dernières décennies ont vu naître une union très remarquée de la biologie et de la photonique. Les promesses de la bio-photonique sont immenses. Ce domaine se situe à l'interface entre l'optique, la chimie, les sciences de la vie et la médecine. La détection simple, rapide et efficace des molécules chimiques ou biologiques est devenue un enjeu important pour les secteurs de la santé, de l'environnement, de l'agriculture, ou encore de l'agro-alimentaire. Parmi les bio-capteurs actuels, ceux qui exploitent une détection optique présentent une sensibilité particulièrement élevée. Le principe de fonctionnement des capteurs optiques passifs se fonde sur les variations de leurs propriétés optiques quand l'indice de réfraction (RI, Refractive Index) de l'analyte change [72-76]. Les capteurs optiques pour les mesures d'indice de réfraction (RI) représentent un sujet de recherche d'actualité très captivant, et de nouvelles technologies sont suggérées. L'application des capteurs à indice de réfraction (RI) inclut les mesures de paramètres comme la température, l'humidité, la composition chimique, la détection d'ADN, des protéines, des cellules et des bactéries [77]. Il existe plusieurs méthodes de détection optique sans marqueurs. Parmi elles, on peut citer :

- La méthode SPR : l'utilisation de la résonance des plasmons de surface SPR à des fins de bio-détection, démontrée en 1982 par Nylander et Liedberg [78 ,79] pour la détection de gaz et de biomolécules. Depuis, de nombreux articles sur les capteurs basés sur le phénomène de la résonance des plasmons de surface SPR ont été publiés [80-83]. Ils sont largement utilisés pour la détection, grâce à leur bas coût et à leur grande facilité d'utilisation. Ce type de capteur biochimique est particulièrement utilisé, car il a prouvé sa capacité à fournir une réponse rapide, en temps réel, et sans utilisation de marqueurs. Ceci vient de la propriété singulière des plasmons de surface de guider la lumière le long d'une interface métal/diélectrique, et ceci précisément en fonction des propriétés du diélectrique. Plus spécifiquement, ce sont des ondes de surface dont les caractéristiques sont très sensibles au milieu diélectrique qui est en contact avec la surface du métal. Une petite variation de l'indice

diélectrique de ce milieu entraine un changement des conditions dites de « résonance ». En mesurant ce changement, il est alors possible de détecter, en temps réel, la présence des espèces chimiques et/ou biochimiques au voisinage de la surface métallique et de réaliser ainsi des capteurs ultra-sensibles.

- L'interférométrie [84] permet de mesurer la différence de parcours optique entre deux faisceaux lumineux grâce aux franges d'interférences. Un biocapteur interférométrique révèle la présence d'analytes modifiant la phase de l'un des faisceaux. Le principe de détection, dans le cas d'un interféromètre, repose sur un changement d'indice de réfraction dû aux analytes. D'autres groupes de recherche ont également étudié des méthodes telles que la résonance colorimétrique dans une surface de réseau de diffraction [85]. Cependant, de telles méthodes exigent un faisceau d'afficheur optique avec une direction bien définie, ce qui signifie de grands faisceaux et une zone de détection relativement grande ($1mm^2$).

IV-3-2 Capteurs à base de cristaux photoniques

Comme indiqué plus haut, la plasmonique de surface a trouvé un champ d'application important dans le domaine de la bio-détection. De la même manière un empilement périodique de diélectriques peut être exploité pour le phénomène de détection. Au cours de ces dernières années, il y a eu intérêt à utiliser ces cristaux photoniques pour mesurer le changement d'indice de réfraction [86-88]. En effet, la micro-structuration périodique du matériau permet de piéger les photons et de créer des résonances optiques très sensibles à la présence des molécules à détecter. Les cristaux photoniques disposent d'un large éventail de détection, les rendant applicables dans une large gamme de mesures s'étendant de l'air jusqu'aux fluides très visqueux. En 2003, J. Topol'ancik et al. [86] ont utilisé des guides d'ondes photoniques multicanaux à base de cristaux photoniques pour la détection de fluide. Un système simple de détection de fluide basé sur la propagation de la lumière à travers des guides d'ondes de défauts linéaires dans les cristaux photoniques est démontrée avec de l'isopropanol et du xylène. Le capteur à cristal photonique à deux guides d'ondes est constitué à partir d'une hétérostructure à base de GaAs. La canalisation préférentielle de lumière est commandée par la variation de l'indice de réfraction de la section de guide d'onde correspondante en raison de la présence du fluide introduit dans les régions de guidage. Dans la même année, Loncard et al. [87] ont utilisé des lasers à base de cristaux photoniques pour la réalisation d'un biocapteur par la surveillance des changements du spectre de sortie du laser dus aux changements de l'indice de réfraction du matériau de sa cavité, ce qui permet la

détection d'infime variation d'indice de réfraction à l'intérieur des échantillons de volumes femto-litres. D'autres types de cristaux photoniques sont utilisés comme capteurs à cause de leur haute sensibilité aux variations d'indices de réfraction, comme les fibres à cristaux photoniques, qui peuvent guider la lumière par effets de bandes interdites photoniques [89-91].

IV-3-2-1 Capteurs à bases de cristaux photoniques à 2D

La recherche sur des capteurs se fondant sur la résonance optique est un domaine de recherche d'actualité. La résonance optique mène aux chutes ou aux pics dans la signature spectrale. Quand les indices de réfraction sont modifiés, la longueur d'onde des chutes ou les crêtes sont décelables. Des capteurs photoniques à base de cristaux photoniques bidimensionnels [92] ont démontré leur capacité, à la fois théoriquement et expérimentalement, à détecter des éléments biochimiques en raison du mécanisme du confinement de la lumière fourni par la bande interdite photonique [25]. Le principe de fonctionnement de ces capteurs repose sur les variations de leurs propriétés optiques lorsque l'indice de réfraction des substances à analyser change en mesurant le décalage de la longueur d'onde de résonance dans le spectre de transmission en fonction de l'indice de réfraction du liquide.

E. Chow et al. [93] ont rapporté une démonstration expérimentale d'un capteur biochimique ultra-compact basé sur une microcavité à cristal photonique à deux dimensions (figure 8). La microcavité, fabriquée sur substrat SOI (silicon on insulator), est conçue pour avoir une longueur d'onde de résonance (λ) autour de 1,5 µm. Le spectre de transmission du capteur est mesuré avec différents indices de réfractions ambiants allant de $n = 1,0$ à $n = 1.5$. Une observation du changement de longueur d'onde de résonance, pour une variation de l'indice de réfraction de Δn ambiante 0,002 a été démontrée. La correspondance entre l'indice de réfraction absolu et la longueur d'onde de résonance est en bon accord avec le calcul numérique avec une précision de 4%. L'évaporation de l'eau dans un mélange de glycérol est également utilisée pour démontrer la capacité de détection résolue dans le temps, qui permet de connaitre les cinétiques du processus de reconnaissance en temps.

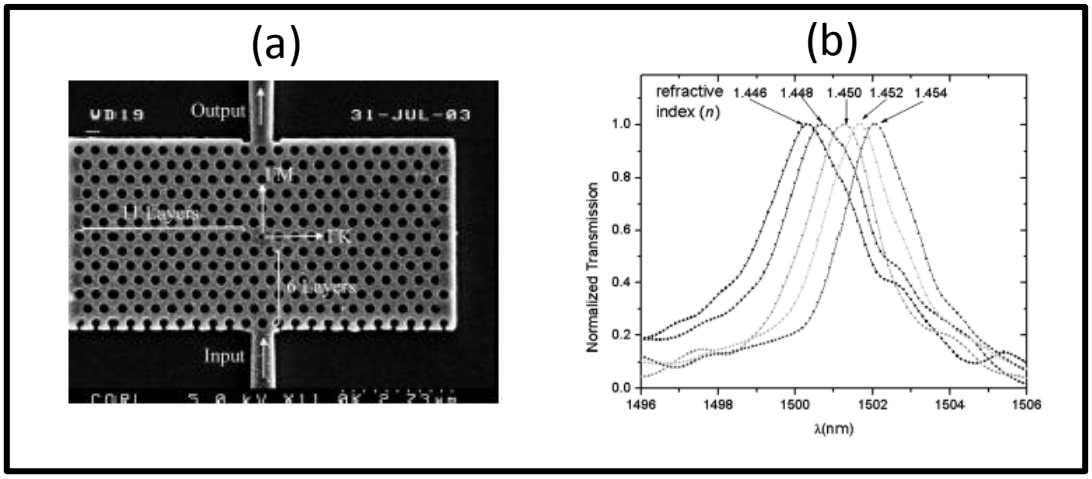


Figure 8 : (a) Vue au microscope électronique à balayage d'une microcavité à cristal photonique intégrée entre deux guides d'ondes (b) Spectres de transmission normalisés de la microcavité montrée en (a) avec cinq différents indices de réfraction allant de n = 1,446 jusqu'à n = 1,454 [93].

Lee et al. [94] ont étudié théoriquement et expérimentalement un biocapteur ultrasensible en utilisant un cristal photonique à deux dimensions ayant une cavité centrale formée par un trou plus petit que les autres trous du cristal photonique. Le dispositif est constitué d'une plaque de SOI (silicon on insulator) et fonctionne à proximité de sa résonance, à 1,58 µm. La cavité est ensuite fonctionnalisée afin de fixer des protéines spécifiques. Lorsque celles-ci s'attachent, le pic de résonance transmis est décalé vers le rouge.

Dans un autre travail, Wang et al. [95] ont proposé un nouveau capteur à indice de réfraction (RI) ultracompact. Sa technique de détection est basée sur une microcavité insérée entre deux guides d'ondes dans un cristal photonique à 2D composé de trous d'air dans un réseau rectangulaire (figure 9a). La microcavité est formée en augmentant le rayon du trou central jusqu'à 0.55a. La longueur des deux guides d'ondes est optimisée à trois trous d'air autour de la cavité pour assurer l'efficacité de la transmission avec un facteur de qualité Q élevé.

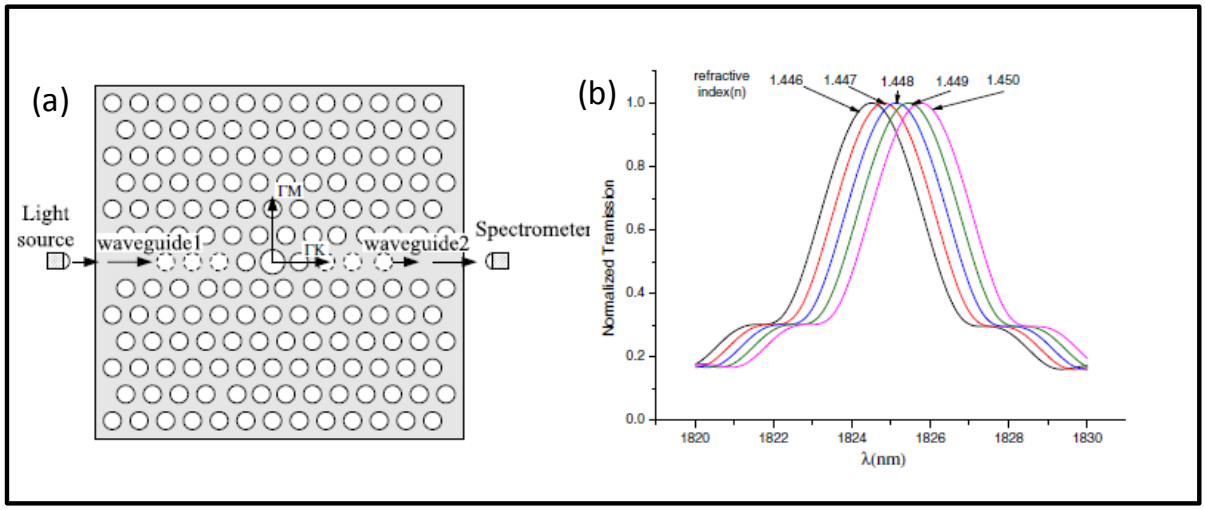


Figure 9 : (a) Dispositif d'un capteur à RI basé sur un CP à 2D avec un réseau triangulaire de trous d'air. La structure se compose d'un guide d'ondes1, microcavité, guide d'ondes 2, une source de lumière cohérente et un spectromètre. (b) Spectres de transmission normalisés du capteur montré en (a) avec cinq différents indices de réfraction allant de n = 1,446 jusqu'à n = 1,450 d'après [95].

Avec cette nouvelle structure, une meilleure résolution du RI a été obtenue, et une meilleurs efficacité de transmission sur une plage de mesure de RI plus large. Les spectres de transmission du capteur avec différents indices de réfraction ambiants s'étendant de n = 1.0 à n = 1.6 sont calculés (figure 9b). Les résultats de ces calculs prouvent qu'un changement de RI ambiant de Δn = de 0.001 est possible conduisant à une sensibilité du capteur (Δλ/Δn) de 330 nm/RIU (pour un paramètre de maille a = 440 nm). Dans ces travaux, les propriétés du capteur sont analysées numériquement en utilisant la méthode des ondes planes (PWE) et la méthode (FDTD).

D'autres auteurs comme Dorfner et al. [96] ont présenté une étude théorique et expérimentale en utilisant un cristal photonique à base de SOI en tant que capteurs à indice de réfraction. La lumière est transmise par évanescence entre deux types de défauts formés de nanocavities (*L3* et *H1-r)* insérés entre deux guides d'ondes W1 dans le cristal photonique (figure10).

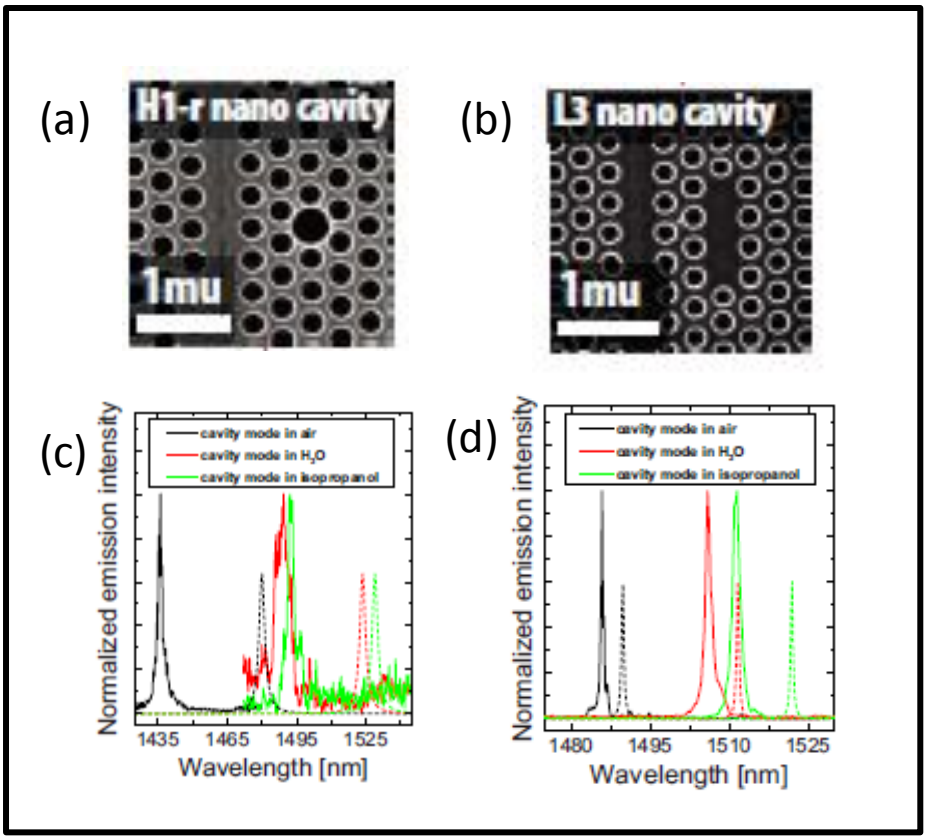


Figure 10 : (a, b) images SEM montrant les cavités H1-r et L3 dans un cristal photonique, (c, d) modes de cavité mesurés pour l'air (n=1,00), eau (n= 1,33), et IPA (n = 1,377) pour la cavité H1-r et cavité L3 respectivement [96].

Notons enfin que d'autres articles basés sur les guides d'ondes dans des cristaux photoniques à 2D on été proposés dans le même but [8, 97-98].

IV-3-2-2 Capteurs à bases de cristaux photoniques à 2D membranaires

Depuis le travail original d'Ebbesen, publié en 1998 [99], la transmission optique extraordinaire à travers un film métallique à motifs de trous cylindriques périodiques, a suscité beaucoup d'intérêt [100]. Dans ce cas, il est montré que la quantité de lumière qui passe à travers les N trous de la matrice est bien plus importante que N fois celle qui passe à travers un trou isolé. L'origine physique de cet effet a été largement discutée en termes de couplage entre la lumière et les plasmons de surfaces excités au voisinage des ouvertures. Des résonances guidées dans les membranes à cristaux photoniques, pouvant se coupler à des rayonnements externes, ont suscité beaucoup d'attention [101-102]. Les aspects théoriques de ces résonances ont également été largement discutées [103-104]. Ces résonances peuvent être utilisées comme base pour de nouveaux capteurs à haute sensibilité [105-108]. Huang et al.

[107] ont réussi à réaliser des capteurs nanofluidique sub-longueur d'onde à cristaux photoniques en utilisant les propriétés de transmission optique extraordinaire (EOT) (figure 11). Dans ce système, l'écoulement de l'analyte est activé par convection à travers les nano-trous du cristal et permet la distribution des analytes dans le capteur avec une sensibilité du capteur de 510 nm/RIU.

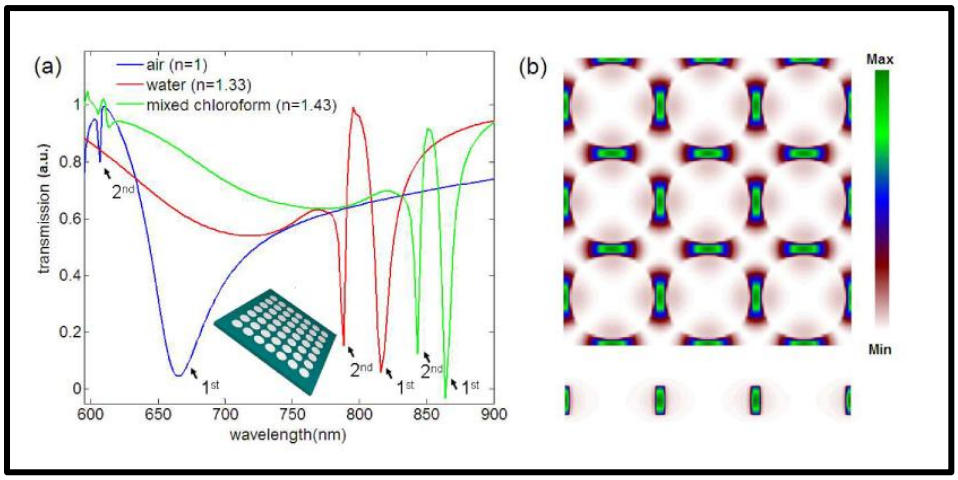


Figure 11 : (a) Spectres de transmission calculés par FDTD-3D pour une plaque de cristal photonique formé en SiN_x et émergée dans trois milieux différents : l'air (bleu), l'eau (rouge) et un mélange d'IPA-chloroforme (vert). En insert, vue schématique de la structure avec les paramètres : r = 270 nm, a = 600 nm et d = 90 nm, respectivement, pour le rayon, le paramètre de maille et l'épaisseur de la plaque. (b) Distribution de l'intensité électromagnétique du 1er mode quand le milieu environnant est l'air [107].

Dans un autre travail, El-Behreiy et al. [109] ont étudié théoriquement la détection de l'indice de réfraction dans un dispositif à cristal photonique formé d'un matériau à haut-indice, le nitrure de silicium (SiNx, n = 2.00). Ils ont estimé la sensibilité des modes guidés en modifiant les modalités de la détection. Le système a ainsi été étudié déposé sur un substrat ou encore suspendu, entièrement plongé dans l'eau ou recouvert du liquide. Dans des travaux récents Nicolaou et al. [110] ont mesuré théoriquement et expérimentalement, la sensibilité d'un capteur photonique composé d'une membrane suspendue formée de (liquide/SiN_x/Air). Cette conception réduit la complexité de fabrication des petites structures à haut facteur de qualité. S. T-Hanic et al. [111] ont proposé une nouvelle approche pour créer des cavités avec des hauts facteurs de qualité Q dans une plaque en cristal photonique avec défaut. L'approche de détection se fait par l'infiltration sélective des trous d'air du cristal photonique. Ils ont montré qu'en employant cette méthode ils peuvent concevoir des microcavités à des Q ultra-

hauts (Q = 10^6). Les calculs numériques indiquent un grand nombre de modes avec une sensibilité élevée et un bon facteur de qualité Q.

IV-4 Capteurs phononiques

IV-4-1 Introduction

En matière de surveillance et de contrôle de processus ou d'analyse chimique ou biochimique, il existe que peu d'exemples dans la littérature faisant état de l'utilisation des cristaux phononiques. En général, l'onde acoustique pénètre et traverse le milieu d'intérêt permettant ainsi de détecter ses propriétés acoustiques. Ces propriétés comprennent les paramètres intrinsèques des matériaux (densité, module d'élasticité, vitesse du son). Le phénomène de détection a été étudié dans des structures multicouches unidimensionnelles. Un tel capteur est constitué d'un arrangement périodique séquentiel de couches liquides et solides le long d'une direction, où l'une des couches de liquide est remplie d'analyte d'intérêt [16, 112, 113]. Le spectre de transmission du système est analysé par le formalisme de matrice de transfert, où un état de défaut peut être identifié par une brusque diminution de la réflectance du cristal phononique parfait. Cette configuration est mise en évidence pour détecter des variations dans les concentrations de 1-propanol et le 2-propanol dans l'eau. Etant donné que la vitesse du son dans un mélange binaire liquide, tel que le mélange eau-propanol, varie en fonction de la concentration, une relation analytique entre la position du pic de transmission observée et la vitesse du son serait bénéfique dans la mesure de celle-ci dans un mélange de concentration connue. En fait, une dépendance linéaire entre le décalage de fréquence de la position du pic et la vitesse du son dans le mélange eau-propanol à de faibles concentrations est rapportée [16,113].

IV-4-2 Capteurs à base de cristaux phononiques bidimensionnels

Les cristaux phononiques à bandes interdites sont présentés comme une nouvelle plateforme pour détecter les propriétés des matériaux dans des petites cavités. Le capteur utilise des pics de transmission spécifiques à l'intérieur de la bande interdite pour déterminer les propriétés d'une composante à la base du cristal phononique. La dépendance de la fréquence dans le

spectre de transmission est corrélée aux propriétés du matériau, plus spécifiquement la vitesse du son dans le liquide. Cette valeur est liée à plusieurs paramètres d'intérêt pratique comme la concentration d'un composant dans un mélange ou le taux de conversion dans un microréacteur. Des capteurs liquides à cristaux phononiques basées sur des modes résonants de cavité à l'intérieur des bandes interdites d'un cristal phononique 2D ont été également rapportés dans la littérature récente [19, 114, 115]. Le phénomène de la transmission de l'onde acoustique longitudinale à travers un cristal phononique ayant une cavité remplie de liquide peut être avantageusement utilisé à des fins de détection [114]. La démonstration est faite dans le cas d'une gouttière à l'intérieur d'un cristal. La cavité est une longue gouttière dans un réseau carré à huit cylindres disposés perpendiculairement à la direction de propagation de l'onde incidente (figure 12a). La détection de la nature du liquide est faite en utilisant le pic de résonance de la cavité. Etant donné que la vitesse du son est fonction du rapport molaire du mélange liquide, le capteur à cristal phononique peut être exploité pour déterminer la concentration du constituant dans le mélange liquide. De tels capteurs sont capables de déterminer la concentration de 1-propanol dans l'eau. Dans une autre étude, A. Oseev et al. [115] ont étudié le même capteur pour la détermination d'indice d'octane de l'essence (figure 12). L'indice d'octane est un paramètre clé pour le fonctionnement normal des moteurs d'automobiles en particulier lorsqu'il est équipé d'un système d'approvisionnement en essence. Si l'indice d'octane de l'essence n'est pas dans la plage définie, le moteur ne fonctionne pas correctement causant une perte significative de puissance et une augmentation de la pollution. La méthode qui est utilisée est basée sur l'analyse du spectre d'émission d'un capteur à cristal phononique rempli avec un mélange d'essence liquide. Ils ont révélé une forte corrélation entre l'indice d'octane d'essence et la fréquence de transmission maximale. Les résultats expérimentaux obtenus montrent que les capteurs à cristaux phononiques peuvent être considérés comme un dispositif prospectif, compétitif et peu coûteux pour la détermination de l'indice d'octane dans l'essence.

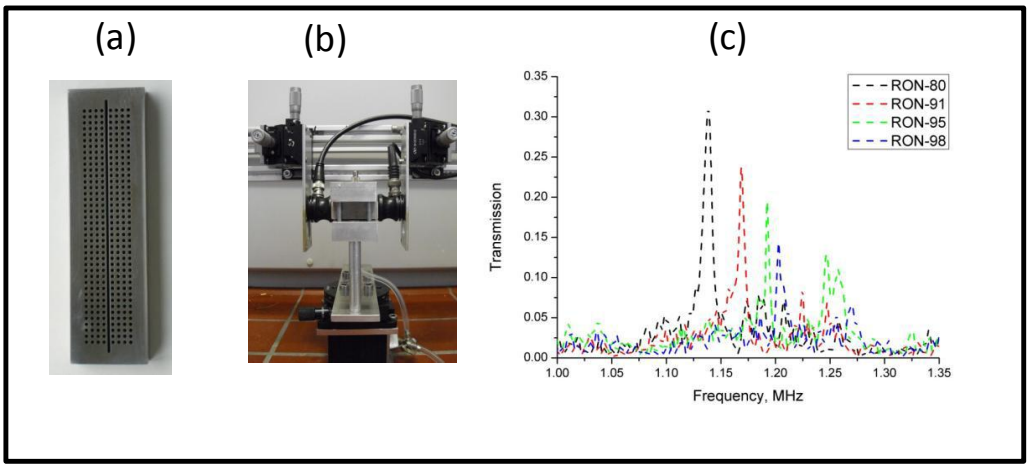


Figure12 **:** (a) Image de la structure. (b) Dispositif expérimental, (c) Courbe de transmission à travers le cristal phononique pour différents indices d'octane [115].

IV-4-3 Capteurs à bases de cristaux phononiques bidimensionnels membranaires

Au cours de ces dernières années les cristaux phononiques sous forme de plaque finie ont fait l'objet de plusieurs études en vue d'explorer la manipulation des ondes de Lamb [116]. Récemment, il a été démontré l'existence d'une transmission acoustique exaltée (EAT) à travers une structure perforée régulièrement de trous immergée dans un liquide. La structure se présente sous la forme d'un réseau unidimensionnel avec des ouvertures étroites [117] ou encore d'un réseau de trous de taille sub-longueur d'onde percés dans des plaques [118-120]. Le comportement des ondes acoustiques se propageant à travers ces structures a fait l'objet de recherches intensives. Lu et al. [117] ont démontré expérimentalement le phénomène de la transmission acoustique exaltée (EAT) à travers des grilles acoustiques 1D avec des ouvertures sub-longueurs d'ondes. L'origine physique des EAT est dû au fort couplage entre la diffraction des ondes excitées sur les surfaces de la plaque et les cavités de Fabry-Perot (FP) des modes résonants à l'intérieur des ouvertures. M. Ke et al. [121] ont montré comment la transmission extraordinaire acoustique dans les cristaux phononiques pouvait être utilisée pour déterminer les propriétés mécaniques des matériaux liquides, sur le modèle du papier de Huang [107] pour les cristaux photoniques. M. Ke et al. [121] ont étudié les propriétés de transmission d'un cristal phononique constitué d'une plaque en acier d'épaisseur moitié comparée à la longueur d'onde incidente, et régulièrement percée de trous circulaires. La plaque est immergée dans un liquide. La démonstration expérimentale est faite avec les dimensions millimétriques. La méthode des différences finies dans le domaine temporel a été

appliquée pour la conception du capteur et les expériences de transmission à ultrasons ont été effectuées. La position du pic de fréquence de l'EAT est démontrée sensible à la vitesse du son du liquide entourant la plaque de cristal phononique et remplissant les trous, et a permis de déterminer le rapport molaire du mélange liquide figure (13c).

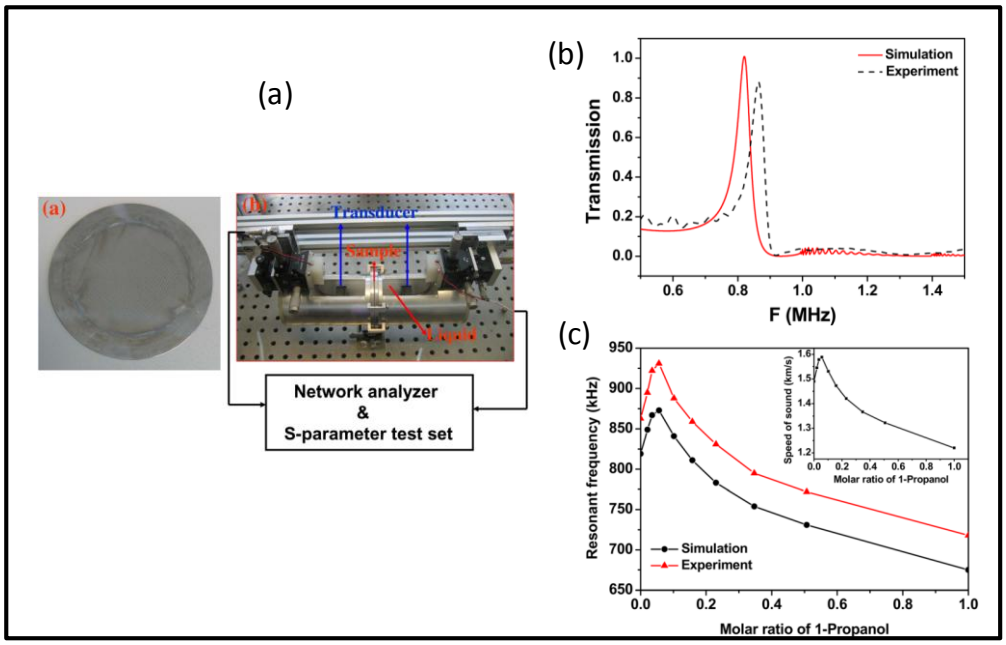


Figure13 **:** (a) *Gauche* : Image optique de la structure. *Droite* : Dispositif expérimental. (b) Exemple de spectre de transmission du système dans lequel la courbe en tirait indique la mesure expérimentale et la ligne continu la simulation par FDTD. (c) Evolution de la fréquence de résonance en fonction du rapport molaire de 1-propanol dans le mélange liquide. La courbe avec des symboles circulaires montre la simulation FDTD et la courbe avec des symboles triangulaires désigne la mesure expérimentale [121].

D'autres travaux réalisés par R. Lucklum et M. Zubtsov [122,123] ont vu le jour sur le même principe. Enfin, récemment, Salman et al. [124] ont démontré numériquement et impossible à réaliser la détermination de la concentration de l'éthanol à l'aide d'un guide d'onde linéaire à deux dimensions dans une membrane phononique formée de trous d'eau dans une matrice de mercure.

V- Capteurs phoxoniques

V-1 Introduction

Comme nous l'avons mentionné plus haut le concept des capteurs à cristal photonique et phononique est basé sur la mesure des changements des propriétés de transmission des dispositifs provoqués par des changements des propriétés matérielles de l'un des matériaux

constituants le cristal. Dans le cas optique il a été démontré que le paramètre principal est l'indice de réfraction, donc la vitesse de la lumière. Dans le cas acoustique le paramètre principal est la vitesse de son. Le capteur à cristal phoxonique [125-126] combine les deux concepts dans un même dispositif, tenant compte d'une détermination parallèle et indépendante des deux propriétés du matériau. Un tel capteur est particulièrement attrayant pour les analytes complexes chimiques et biochimiques, en offrant une source d'information supplémentaire.

IV-2 Principales caractéristiques d'un capteur phoxonique

Un capteur photonique/phononique repose sur les variations de ses propriétés optiques et acoustiques lorsque l'indice de réfraction et la vitesse acoustique des substances à analyser changent [127,16]. La modification de l'indice de réfraction ou de la vitesse acoustique d'une solution à analyser se manifeste par un décalage spectral d'un pic de résonance ou une atténuation de l'intensité lumineuse ou acoustique transmise dans le dispositif. Pour des applications de détection deux méthodes d'interrogation sont présentes dans la littérature : balayage spectral en fréquence ou en longueur d'onde et la variation de l'intensité à une longueur d'onde fixe [128]. Les travaux présentés dans cette thèse sont basés sur la première méthode. Son principe consiste à suivre à partir d'une solution de référence, l'évolution de la position d'un pic de résonance pour différentes concentrations des substances à analyser. Les performances spectrales d'un capteur phoxonique sont déterminées à partir de la réponse spectrale (voir figure 14). Cette réponse spectrale correspond à l'intensité transmise en fonction de la longueur d'onde ou de la fréquence. Plusieurs performances du capteur peuvent être distinguées, les plus importantes étant le facteur de qualité, la sensibilité, et la figure de Merit. Nous allons définir dans le paragraphe suivant ces trois caractéristiques. Les différentes valeurs définissant le facteur de qualité et la sensibilité sont représentés sur la figure 14 et interviennent dans les relations 1 et 3.

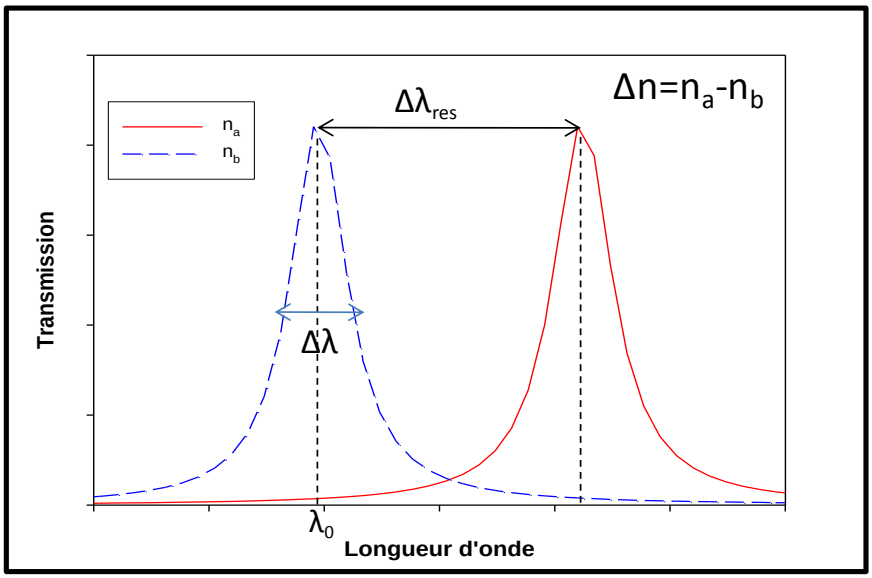


Figure 14 : Réponse spectrale d'un capteur phoxonique pour deux indices de réfraction qu'il soit optique ou acoustique.

IV-2-1 Facteur de qualité

Comme dans les micro-dispositifs destinés à l'intégration optique et acoustique et réalisant des fonctions tels que le filtrage, les capteurs phoxoniques utilisent des résonances optiques et acoustiques qui doivent présenter une finesse la plus grande possible. Ceci se traduit par une recherche de haut facteur de qualité. Par définition le facteur de qualité est défini comme étant le rapport de la fréquence de résonance angulaire sur la largeur à mi-hauteur du pic ou du zéro de transmission [129, 130], soit :

$$Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \tag{1.1}$$

ou bien, en termes de longueur d'onde :

$$Q = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda} \tag{1.2}$$

IV-2-2 Sensibilité et figure de Merit

La sensibilité S du capteur est définie comme le rapport entre la variation du paramètre caractérisant la résonance (voir figure 14) et la grandeur à mesurer.

En photonique, cette définition s'écrit

$$S_{photonique} = \frac{\Delta\lambda_{res}}{\Delta n} \quad [\text{nm/RIU}] \qquad (1.3)$$

et en phononique elle devient :

$$S_{phononique} = \frac{\Delta f_{res}}{\Delta v} \quad [\text{Hz/ms}^{-1}] \qquad (1.4)$$

Cette sensibilité renseigne donc sur le déplacement du mode en fonction de la variation d'indice (ou de vitesse). Dans le cas d'un capteur linéaire, la sensibilité du capteur est constante.

La figure de Merit (FoM) est obtenue en divisant la sensibilité par la largeur de raie de résonance [131]. Elle apporte, en plus de la sensibilité, l'information de la finesse du pic de résonance.

Elle est donnée en photonique par la relation suivante :

$$FoM = \frac{S}{\Delta\lambda} \qquad [\text{RIU}^{-1}] \qquad (1.5)$$

et en phononique elle est définie par $FoM = \frac{S}{\Delta f}$ $[(\text{m/s})^{-1}]$ (1.6)

Bien que la sensibilité et la figure de Merit aient tous deux été initialement, définies en termes de longueur d'onde en photonique et de fréquence en phononique, il est possible également de définir le décalage en termes d'énergie de résonance lors de l'analyse des spectres [132,133].

IV-3 Cadre d'étude et formalisme utilisé

Dans ce travail de thèse, nous avons modélisé deux structures, la première est un cristal phoxonique composé d'une matrice percée de trous, où la rangée centrale agit en tant que récipient d'analyte. La deuxième géométrie est une plaque percée de trous plongée dans l'analyte. Le matériau utilisé est du silicium du fait de son intérêt technologique pour l'électronique et les télécommunications. En effet, ce matériau est largement utilisé dans l'industrie de la microélectronique, d'une part pour la maturité des techniques de fabrication déjà développées, et d'autre part pour ses bonnes qualités optiques (faibles pertes aux longueurs d'onde télécom). Notre étude consiste à calculer le spectre de transmission qui, en présence d'un analyte (élément à analyser), induirait un déplacement en fréquence d'une

valeur déterminée. Nous allons étudier indépendamment le comportement de ces structures vis-à-vis des ondes acoustiques et optiques. Pour cela, nous allons rappeler dans ce paragraphe les équations fondamentales régissant la propagation des ondes électromagnétiques et élastiques dans la structure phoxonique.

En photonique les équations de Maxwell régissant la dynamique des ondes électromagnétiques dans un milieu matériel s'écrivent :

$$\begin{cases} \overrightarrow{rot}(\vec{E}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & (1.7) \\ div(\vec{E}) = \rho/\varepsilon & (1.8) \\ \overrightarrow{rot}(\vec{B}) = \mu\vec{J} + \mu\,\varepsilon\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & (1.9) \\ div(\vec{B}) = 0 & (1.10) \end{cases}$$

où $\vec{E}$ est le champ électrique, ε et μ sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du milieu considéré, ρ la densité de charges électriques, $\vec{J}$ la densité de courant et $\vec{B}$ est le champ d'induction magnétique.

Les champs et inductions sont reliés par les relations suivantes :

$$\vec{B} = \mu\vec{H} \quad (1.11)$$

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E} \quad (1.12)$$

Dans notre cas, le milieu est non magnétique (μ_0), électriquement neutre ($\rho = 0$) et avec une densité de courant nulle $j = 0$.

En phononique, nous travaillerons dans le cadre de l'élasticité linéaire. La propagation d'une onde élastique dans un milieu composite et isotrope est donnée par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} & (1.13) \\ \sigma_{ij} = C_{ijkl}\ \varepsilon_{ij} & (1.14) \\ \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) & (1.15) \end{cases}$$

Dans lesquelles ρ est la densité volumique du cristal, u_i représente le déplacement suivant la direction i, ε_{ij} désigne le tenseur des déformations, C_{ijkl} le tenseur des constantes élastiques et σ_{ij} le tenseur des contraintes.

Dans les deux cas électromagnétique et élastique, de nombreuses méthodes existent afin de résoudre ces équations de propagation comme les ondes planes (PWE), la méthode des éléments finis (FEM), les matrices de transfert, les fonctions de Green, la méthode des différences finies (FDTD),... Ce travail s'appuie sur la méthode des différences finies sur laquelle nous reviendrons dans le deuxième chapitre traitant de la modélisation.

V- Conclusion

Dans ce chapitre nous avons, dans un premier temps, rappelé les définitions des cristaux photoniques et phononiques et les différentes similarités entre ces deux concepts. Nous avons ensuite défini les cristaux phoxoniques et présentés quelques résultats de travaux réalisés sur les calculs des structures de bandes phoxoniques disponibles dans la littérature. Dans la deuxième partie, nous avons défini les capteurs ainsi que leurs différentes caractéristiques et les concepts de capteurs photoniques et phononiques et les quelques travaux réalisés dans ce domaine. La dernière partie présente les éléments de définition d’un capteur phoxonique ainsi que ses différentes caractéristiques comme le facteur de qualité la sensibilité et la figure de Merit. Enfin, les formalismes utilisés ont été définis.

Bibliographie

[1] E. Yablonovitch and T. Gmitter, *Photonic band structure: the face-centered-cubic case*, J. Opt. Soc. Am. 7, 9 (1990).

[2] M. Loncar, D. Nedeljkovi, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer and T. P. Pearsall, *Waveguiding in planar photonic crystals*, Appl. Phys. Lett. 77, 13 (2000).

[3] Y. Akahane, T. Asano, B. S. Song and S. Noda, *High-Q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal*, Nature 425, 6961 (2003).

[4] M. Koshiba, *Wavelength division multiplexing and demultiplexing with photonic crystal waveguide couplers*, J. Lightwave Tech. 19**,** 12 (2001).

[5] O. Levi, M. M. Lee, J. Zhang, V. Lousse, S. R. J. Brueck, S. Fan and J. S. Harris, *Sensitivity analysis of a photonic crystal structure for index of refraction sensing*, Proc. of SPIE 6447, 64470 (2007).

[6] S. Zlatanovic, L.W. Mirkarimi, M. M. Sigalas, M. A. Bynum, E. Chow, K. M. Robotti, G.W. Burr, S. Esener and A. Grot, *Photonic crystal microcavity sensor for ultracompact monitoring of reaction kinetics and protein concentration*, Sensors and Actuators B 141, 13 (2009).

[7] N. Skivesen, A. Têtu and M. Kristensen, *Photonic-crystal waveguide biosensor***,** Opt. express 15, 6 (2007).

[8] Y-N. Zhang, Y. Zhao and Q. Wang, *Multi-component gas sensing based on slotted photonic crystal waveguide with liquid infiltration*, Sensors and Actuators B 184, 179 (2013).

[9] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Elastic and Acoustic-Wave Band-Structure*, J. Sound Vibrat. 158(2), 377 (1992).

[10] M. S. Kushwaha, *Stop-bands for periodic metallic rods: Sculptures that can filter the noise*, Appl. Phys. Lett 70, 3218 (1997).

[11] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J.O. Vasseur, P.A. Deymier, Ph. Lambin and L. Dobrzynski, *Transmittivity through straight and stublike waveguides in a two-dimensional phononic crystal*, Phys. Rev. B 65, 174308 (2002).

[12] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec and A-C. Hladky-Hennion, *Absolute forbidden bands and waveguiding in two-dimensional phononic crystal plates*, Phys. Rev. B 77, 085415 (2008).

[13] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, H. Larabi, A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane and V. Laude, *Acoustic channel drop tunneling in a phononic crystal*, Appl. Phys. Lett 87, 261912 (2005).

[14] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, A. Khelif and P. A. Deymier, *Tunable filtering and demultiplexing in phononic crystals with hollow cylinders*, Phys. Rev. E 69, 046608 (2004).

[15] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, Ph. Lambin and L. Dobrzynski, *Transmittivity through straight and stublike waveguides in a two-dimensional phononic crystal*, Phys. Rev. B 65, 174308 (2002).

[16] R. Lucklum and J Li, *Phononic crystals for liquid sensor applications***,** Meas. Sci.Technol. 20**,** 124014 **(**2009).

[17] A. Oseev, R. Lucklum, M. Ke, M. Zubtsov and R. Grundmann. *Phononic crystal sensor for liquid property determination*, Proc. of SPIE 8346, 834607 (2012).

[18] M. Maldovan and E. L. Thomas, *Simultaneous complete elastic and electromagnetic band gaps in periodic structures*, Appl. Phys. B 83, 595 (2006).

[19] Y. El Hassouani, C. Li, Y. Pennec, E. H. El Boudouti, H. Larabi, A. Akjouj, O. Bou Matar, V. Laude, N. Papanikolaou, A. Martinez and B. Djafari Rouhani, *Dual phononic and photonic band gaps in a periodic array of pillars deposited on a thin plate***,** Phys. Rev. B 82, 155405 (2010).

[20] N. Papanikolaou, I. E. Psarobas and N. Stefanou**,** *Absolute spectral gaps for infrared light and hypersound in three-dimensional metallodielectric phoxonic crystals*, Appl. Phys. Lett. 96, 231917 (2010).

[21] T. P. M. Alegre, A. Safavi-Naeini, Martin Winger, O. Painter, *Quasi-two dimensional optomechanical crystals with a complete phononic bandgap*, Opt. Express 19, 6 (2011).

[22] E. Gavartin, R. Braive, I. Sagnes, O. Arcizet, A. Beveratos, T. J. Kippenberg and I. Robert-Philip, *Optomechanical Coupling in a Two-Dimensional Photonic Crystal Defect Cavity*, Phys. Rev. Lett. 106, 203902 (2011).

[23] A. H. Safavi-Naeini, T. P. M. Alegre, M. Winger and O. Painter, *Optomechanics in an ultrahigh- Q two-dimensional photonic crystal cavity*, Appl. Phys. Lett. 97, 181106 (2010).

[24] B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec, *Phononic and phoxonic crystal slabs sensors*, SPIE Smart Structures/NDE 2012, Smart Sensor Phenomena, Technology, Networks, and Systems Integration V, San Diego, CA, USA, march 11-15, 2012, paper 8346-02.

[25] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N.Winn, R. D. Meade, *Photonic Crystals Molding the Flow of Light*, 2nd ed.; Princeton University Press: Princeton, NJ, USA, 2008.

[26] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, *Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites*, Phys. Rev. Lett, 71, 2022 (1993).

[27] Jacquier Bernard. *Nano-optique du solide*, Traité EGEM, série optoélectronique Lavoisier (2012).

[28] K. Kertész, Z. Bálint, Z. Vértesy, G. I. Márk, V. Lousse, J. P. Vigneron, Marie Rassart, and L. P. Biró, *Gleaming and dull surface textures from photonic-crystal-type nanostructures in the butterfly Cyanophrys remus*, Phys. Rev. E 74, 021922 (2006).

[29] E. Yablonovitch, *Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics*, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).

[30] S. John, *Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices*, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987).

[31] E. Yablonovitch, *Photonic band-gap structures*, J. Optic. Soc. Am., 10, 283 (1993).

[32] R- D. Meade, K.-D. Brommer, A-M. Rappe and J. D. Joannopoulos, *Existence of a photonic band gap in two dimensions***,** Appl. Phys. Lett. 61, 495 (1992).

[33] E. Yablonovitch, T. J. Mitter and K. M. Leung, *Photonic Band Structure: The Face-Centered-Cubic Case Employing Nonspherical Atoms*, Phys. Rev. Lett. 67, 2295 (1991).

[34] J-P. Dowling, M- Scalora, M-J. Bloemer and C- M. Bowden, *The photonic band edge laser: A new approach to gain enhancement***,** J. Appl. Phys. 75, 1896 (1994).

[35] Z. Zhang, and S. Satpathy, *Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell's equations*, Phys. Rev. Lett. 65, 2650 (1990).

[36] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, et J. D. Joannopoulos, *Photonic bound states in periodic dielectric materials*, Phys. Rev. B 44, 13772 (1991).

[37] M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, C. T. Chan and K. M. Ho, *Photonic band gaps and defects in two dimensions: Studies of the transmission coefficient*, Phys. Rev. B 48, 14121 (1993).

[38] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, *Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites*, Phys. Rev. B 49, 2313 (1994).

[39] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, G. Frantziskonis, G. Hong, B. Djafari Rouhani and L. Dobrzynski, J. *Experimental evidence for the existence of absolute acoustic band gaps in two-dimensional periodic composite media*, Phys.: Condens. Matter 10, 6051 (1998).

[40] F. R. Montero de Espinosa, E. Jimenez and M. Torres, *Ultrasonic Band Gap in a Periodic Two-Dimensional Composite*, Phys. Rev. Lett. 80, 1208 (1998).

[41] M. Torres, F. R. Montero de Espinosa, D. Garica-Pablos and N. Garcia, *Sonic Band Gaps in Finite Elastic Media: Surface States and Localization Phenomena in Linear and Point Defects*, Phys. Rev. Lett. 82, 3054 (1999).

[42] M. M. Sigalas, *Defect states of acoustic waves in a two-dimensional lattice of solid cylinders*, J. Appl. Phys 84, 3026 (1998).

[43] M. Kafesaki, M. M. Sigalas and N. Garcia, Phys. Rev. Lett. *Frequency Modulation in the Transmittivity of Wave Guides in Elastic-Wave Band-Gap Materials*, Phys. Rev. Lett 85, 4044 (2000).

[44] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani and V. Laude, *Guiding and bending of acoustic waves in highly confined phononic crystal waveguides*, Appl. Phys. Lett. 84, 4400 (2004).

[45] S. Benchabane, A. Khelif, A. Choujaa, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, *Interaction of waveguide and localized modes in a phononic crystal*, Europhys. Lett. 71, 570 (2005).

[46] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur and H. Larabi, *Acoustic channel drop tunneling in a phononic crystal*, Appl. Phys. Lett. 87, 261912 (2005).

[47] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur and P. A. Deymier, *Transmission and dispersion relations of perfect and defect-containing waveguide structures in phononic band gap materials*, Phys. Rev. B 68, 024302 (2003).

[48] P. Lacharmoise, A. Fainstein, B. Jusserand and V. Thierry-Mieg, *Optical cavity enhancement of light–sound interaction in acoustic phonon cavities*, Appl. Phys. Lett. 84, 3274 (2004).

[49] M. Trigo, A. Bruchhausen, A. Fainstein, B. Jusserand and V. Thierry-Mieg, *Confinement of Acoustical Vibrations in a Semiconductor Planar Phonon Cavity*, Phys. Rev. Lett. 89, 227402 (2002).

[50] I. E. Psarobas and N. Papanikolaou, *Enhanced acousto-optic interactions in a one-dimensional phoxonic cavity*, Phys. Rev. B 82, 174303 (2010).

[51] N. Papanikolaou, I. E. Psarobas, N. Stefanou, B. Djafari-Rouhani, B. Bonello and V. Laude *Light modulation in phoxonic nanocavities Microelectronic Engineering* 90, 155 (2012).

[52] M. Maldovan and E. L. Thomas, *Simultaneous localization of photons and phonons in two-dimensional periodic structures*, Appl. Phys. Lett. 88, 251907 (2006).

[53] A. V. Akimov, Y. Tanaka, A. B. Pevtsov, S. F. Kaplan, V. G. Golubev, S. Tamura, D. R. Yakovlev and M. Bayer, *Hypersonic Modulation of Light in Three-Dimensional Photonic and Phononic Band-Gap Materials*, Phys. Rev. Lett. 101, 033902 (2006).

[54] S. Sadat-Saleh, S. Benchabane, F. I. Baida, M. P. Bernal and V. Laude, *Tailoring simultaneous photonic and phononic band gaps*, J. Appl. Phys. 106, 074912 (2009).

[55] D. Bria, M. B. Assouar, M. Oudich, Y. Pennec, J. Vasseur et al, *Opening of simultaneous photonic and phononic band gap in twodimensional square lattice periodic structure*, J. Appl. Phys. 109, 014507 (2011).

[56] T-X. Ma, Y-S. Wang and C. Zhang, *Investigation of dual photonic and phononic bandgaps in two-dimensional phoxonic crystals with veins, Opt Comm* 312, 68 (2014).

[57] Q. Rolland, M. Oudich, S. El-Jallal, S. Dupont, Y. Pennec et al., *Acousto-optic couplings in two-dimensional phoxonic crystal cavities*, Appl. Phys. Lett. 101, 061109 (2012).

[58] S. El-Jallal, M. Oudich, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, J-C. Beugnot, A. Martinez, J. M. Escalante and A. Makhoute, *Analysis of optomechanical coupling in two-dimensional square lattice phoxonic crystal slab cavities*, Phys. Rev. B 88, 205410 (2013).

[59] S. Fan, P. Villeneuve, J. Joannopoulos and H. Haus, *Channel drop filters in photonic crystals*, Opt. Express 3, 4 (1998).

[60] Y. Pennec, J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski and P. A. Deymier, *Two-dimensional phononic crystals: Examples and applications*, Surface Science Reports 65, 229 (2010).

[61] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos and L. A. Kolodziejski, *Guided modes in photonic crystal slabs*, Phys. Rev. B 60, 5751 (1999).

[62] S. Shi, C. Chen, and D. W. Prather, *Plane-wave expansion method for calculating band structure of photonic crystal slabs with perfectly matched layers*, J. Opt. Soc. Am. A 21, 1769 (2004).

[63] A. Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi and V. Laude, *Complete band gaps in two-dimensional phononic crystal slabs*, Phys. Rev. E 74, 046610 (2006).

[64] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec and A. C. Hladky-Hennion, *Absolute forbidden bands and waveguiding in two-dimensional phononic crystal plates*, Phys. Rev. B 77, 085415 (2008).

[65] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, H. Larabi, J. O. Vasseur and A. C. Hladky-Hennion, *Low-frequency gaps in a phononic crystal constituted of cylindrical dots deposited on a thin homogeneous plate*, Phys. Rev. B 78, 104105 (2008).

[66] S. Mohammadi, A. A. Eftekhar, A. Khelif and A. Adibi, *Simultaneous two dimensional phononic and photonic band gaps in opto-mechanical crystal slabs*, Opt. Express 18, 9164 (2010).

[67] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, E. H. El Boudouti, C. Li, Y. El Hassouani, J. O. Vasseur, N. Papanikolaou, S. Benchabane, V. Laude and A. Martinez, *Simultaneous existence of phononic and photonic band gaps in periodic crystal slabs*, Opt. Express 18, 14301 (2010).

[68] V. Laude, J-C. Beugnot, S. Benchabane, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, N. Papanikolaou, J.M. Escalante and A. Martinez, *Simultaneous guidance of slow photons and slow acoustic phonons in silicon phoxonic crystal slabs*, Opt. Express 19, 9690 (2011).

[69] A. H. Safavi-Naeini and O. Painter, *Design of optomechanical cavities and waveguides on a simultaneous bandgap phononic-photonic crystal slab*, Opt. Express 18, 14926 (2010).

[70] B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec, E. H. El Boudouti, J. O. Vasseur, Y. El Hassouani, C. Li, A. Akjouj and D. Bria, *Band gap engineering in simultaneous phononic and photonic crystal slabs*, Appl. Phys. A 103, 735 (2011).

[71] Y. Pennec, B. Djafari Rouhani, E. H. El Boudouti, C. Li, Y. El Hassouani, J. O. Vasseur, N. Papanikolaou, S. Benchabane, V. Laude and A. Martinez, *Band gaps and waveguiding in phoxonic silicon crystal slabs, Chinese Journal of Physics* 49, 100 (2011).

[72] J. Homola, S. Yee and G. Gauglitz, *Surface plasmon resonance sensors*: review, Sens. Actuators B Chem. 54, 3 (1999).

[73] M. Adams, G. DeRose, M. Loncar, and A. Scherer, *Lithographically fabricated optical cavities for refractive index sensing*, J. Vac. Sci. Techl. B 23, 3168 (2005).

[74] R.V. Nair and R.Vijaya, *Photonic crystal sensors: An overview, Progress in Quantum Electronics* 34, 89 (2010).

[75] T. Xu, M. X, N. Zhu, K. Priyadarshini, W. Lech, A. Stewart and R. Harry, *Silicon-on-insulator nanopillar-array optical sensor*, Nanoscale Imaging, *Sensing, and Actuation for Biomedical Applications* VIII, Proc. of SPIE 7908, 79080 (2011).

[76] M. G. Scullion, T. F. Krauss and A. Di Falco, *Slotted Photonic Crystal Sensors, Sensors* 13, 3675 (2013).

[77] N. Skivesen, A. Têtu, M. Kristensen, J. Kjems, L. H. Frandsen and P. I. Borel, *Photonic-crystal waveguide biosensor*, Opt. Express 15, 3169 (2007).

[78] C. Nylander, B. Liedberg and T. Lind, *Gas detection by means of surface Plasmon resonance, sensors and actuators* 3, 79 (1982).

[79] B. Liedberg, C. Nylander and I. Lunström, *Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing*, Sensors and actuators 4, 299 (1983).

[80] A. J. Haes, S. Zou, G. C. Schatz and R. P. Van Duyne, A Nanoscale *Optical Biosensor: The Long Range Distance Dependence of the Localized Surface Plasmon Resonance of Noble Metal Nanoparticles*, J. Phys. Chem. B 108, 109 (2004).

[81] A. J. Haes and R. P. Van Duyne, *A unified view of propagating and localized surface plasmon resonance biosensors*, Anal. Bioanal. Chem. 379, 920 (2004).

[82] A. D. Leebeeck, L. K. Swaroop Kumar, V. D. Lange, D. Sinton, R. Gordon and A. G. Brolo, *On-Chip Surface- Based Detection with Nanohole Arrays*, Anal. Chem. 79, 4094 (2007).

[83] A. Artar, A. A. Yanik and H. Altug, *Fabry–Pérot nanocavities in multilayered plasmonic crystals for enhanced biosensing*, Appl. Phy. Lett. 95, 051105 (2009).

[84] V. S-Y. Lin, K. Motesharei, K.-P. S. Dancil, M. J. Sailor and M. R. Ghadir, *A porous silicon-based optical interferometric biosensor*, Sc 278, 840 (1997).

[85] B. T. Cunningham, P. Li, B. Lin, J. Pepper, B. Hugh, *A plastic colorimetric resonant optical biosensor for multiparallel detection of label-free biochemical interaction*, Sens. Actuators B 81**,** 316 (2002).

[86] J. Topolancik, P. Bhattacharya, J. Sabarinathan and P. C. Yu, *Fluid detection with photonic crystal-based multichannel waveguides*, Appl. Phys. Lett. 82, 1143 (2003).

[87] M. Loncar, A. Scherer and Y. Qiu, *Photonic crystal laser sources for chemical detection*, Appl. Phys. Lett. 82, 4648 (2003).

[88] C. Lei, H. Yi-Dong, M. Xiao-Yu, LI Fei, Z. Wei and P. Jiang-De, *Fluid Sensor Based on Transmission Dip Caused by Mini Stop-Band in Photonic Crystal Slab*, Chin. Phys. Lett. 25, 2101 (2008).

[89] C-B Kim and C. B Su, *Measurement of the refractive index of liquids at 1.3 and 1.5 micron using a fibre optic Fresnel ratio meter*, Meas. Sci. Tech. 15, 1683 (2004).

[90] F. Shi, J. Wang, Y. Zhang, Y. Xia and L. Zhao, *Refractive Index Sensor Based on S-Tapered Photonic Crystal Fiber*, IEEE Photonics Technology Letters 25, 344 (2013).

[91] R. Gao, Y. Jiang and S. Abdelaziz, *All-fiber magnetic field sensors based on magnetic fluid-filled photonic crystal fibers*, Opt. Lett. 38, 1539 (2013).

[92] H. Altug and J. Vuckovic, *Polarization control and sensing with two-dimensional coupled photonic crystal microcavity arrays*, Opt. Lett. 30, 982 (2005).

[93] E. Chow, A. Grot, L. W. Mirkarimi, M. Sigalas and G. Girolami, *Ultracompact biochemical sensor built with two-dimensional photonic crystal microcavity*, Opt. Lett. 29, 1093 (2004).

[94] M. Lee and P. M. Fauchet, *Two-dimensional silicon photonic crystal based biosensing platform for protein detection*, Opt. Express 15, 4530 (2007).

[95] X. Wang , Z. Xu, N. Lu, J. Zhu and G. Jin, *Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure*, Opt. Comm 281, 1725 (2008).

[96] D. F. Dorfner, T. Hürlimann, T. Zabel, L. H. Frandsen, G. Abstreiter et al. *Silicon photonic crystal nanostructures for refractive index sensing*, Appl. Phys. Lett. 93, 181103 (2008).

[97] S. C. Buswell, V. A. Wright, J. M. Buriak, V. Van and S. Evoy, *Specific detection of proteins using photonic crystal waveguides*, Opt. Express 16, 15949 (2008).

[98] Y. Zhao, Y-N. Zhang and Q. Wang, *High sensitivity gas sensing method based on slow light in photonic crystal waveguide*, Sensors and Actuators B 173, 28 (2012).

[99] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio and P. A. Wolff, *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays*, Nature 39, 667 (1998).

[100] C. Genet and T. W. Ebbesen, Light in tiny hole, Nature 445, 39 (2007).

[101] S. Fan and J. D. Joannopoulos, *Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs*, Phys. Rev. B 65, 235112 (2002).

[102] K. B. Crozier, V. Lousse, O. Kilic, S. Kim, S. Fan and O. Solgaard, Air-bridged *photonic crystal slabs at visible and near-infrared wavelengths*, Phys. Rev. B 73, 115126 (2006).

[103] S. Fan, W. Suh and J. D. Joannopoulos, *Temporal coupled-mode theory for the Fano resonance in optical resonators*, J. Opt. Soc. Am. A 20, 569 (2003).

[104] G. Gantzounis and N. Stefanou, *Theoretical analysis of three-dimensional polaritonic photonic crystals*, Phys. Rev. B 72, 075107 (2005).

[105] W. Suh, M. F. Yanik, O. Solgaard and S. Fan, *Displacement-sensitive photonic crystal structures based on guided resonance in photonic crystal slabs*, Appl. Phys. Lett 82, 1999 (2003).

[106] W. Suh, O. Solgaard and S. Fan, *Displacement sensing using evanescent tunneling between guided resonances in photonic crystal slabs*, J. Appl. Phys. 98, 033102 (2005).

[107] M. Huang, A. Ali Yanik, T-Y Chang and H. Altug, *Sub-wavelength nanofluidics in photonic crystal sensors*, Opt. Express 17, 26 (2009).

[108] J. O. Grepstad, P. Kaspar, O. Solgaard, I-R Johansen and A. S. Sudbo, *Photonic-crystal membranes for optical detection of single nano-particles, designed for biosensor application*, Opt. Express 20, 7954 (2012).

[109] M. El Beheiry, V. Liu, S. Fan and O. Levi, *Sensitivity enhancement in photonic crystal slab biosensors*, Opt. Express 18, 22 (2010).

[110] C. Nicolaou, W. T. Lau, R.Gad, H. Akhavan, R. Schilling and O. Levi, *Enhanced detection limit by dark mode perturbation in 2D photonic crystal slab refractive index sensors*, Opt. Express 21, 31698 (2013).

[111] S. Tomljenovic-Hanic and C. Martijn de Sterke, *Reconfigurable, Defect-Free, Ultrahigh-Q Photonic Crystal Microcavities for Sensing*, Sensors 13, 3262 (2013).

[112] R. Lucklum, Phononic crystal sensor, IEEE International Frequency Control Symposium, pp. 85–90, 2008, http://dx.doi.org/10.1109/FREQ.2008.4622962.

[113] R. Lucklum, J. Li and M. Zubtsov, *1D and 2D Phononic Crystal Sensors*, Eurosensors XXIV, Procedia Engineering 5, 436 (2010).

[114] R. Lucklum, M. Ke and M. Zubtsov, *Two-dimensional phononic crystal sensor based on a cavity mode*, Sensors and Actuators B 171, 271 (2012).

[115] A. Oseev, M. Zubtsov and R. Lucklum, *Gasoline properties determination with phononic crystal cavity sensor*, Sens. Actuators B: Chem. 189, 208 (2013).

[116] Z. Hou and B. M. Assouar, *Modeling of Lamb wave propagation in plate with two-dimensional phononic crystal layer coated on uniform substrate using plane-wave-expansion method*, Phys. Lett. A 372, 2091 (2008).

[117] M. H. Lu, X. K. Liu, L. Feng, J. Li, C. P. Huang, Y. F. Chen, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu and N. B. Ming, *Extraordinary Acoustic Transmission through a 1D Grating with Very Narrow Apertures*, Phys. Rev. Lett. 99, 174301 (2007).

[118] B. Hou, J. Mei, M. Ke, W. Wen, Z. Liu, J. Shi and P. Sheng, *Tuning Fabry-Perot resonances via diffraction evanescent waves*, Phys. Rev. B 76, 054303 (2007).

[119] H. Estrada, P. Candelas, A. Uris, F. Belmar, F. J. García de Abajo and F. Meseguer, *Extraordinary Sound Screening in Perforated Plates*, Phys. Rev. Lett. 101, 084302 (2008).

[120] J. Christessen, L. Martin-Moreno and F. J. Garcia-Vidal, *Theory of Resonant Acoustic Transmission through Subwavelength Apertures*, Phys. Rev. Lett. 101, 014301 (2008).

[121] M. Ke, M. Zubtsov and R. Lucklum, *Sub-wavelength phononic crystal liquid sensor*, J. Appl. Phys. 110, 026101 (2011).

[122] R. Lucklum, M. Zubtsov, M. Ke, B. Henning and U. Hempel, *2D Phononic Crystal Sensor with Normal Incidence of Sound*, Proc. Eurosensors XXV, Procedia Engineering 25, 787 (2011).

[123] M. Zubtsov, R. Lucklum, M. Ke, A. Oseev, R. Grundmann, B. Henning and U. Hempel, *2D phononic crystal sensor with normal incidence of sound*, Sensors and Actuators A 186, 118 (2012).

[124] A. Salman, O. A. Kaya and A. Cicek, *Determination of concentration of ethanol in water by a linear waveguide in a 2-dimensional phononic crystal slab*, Sensors and Actuators A: Physical 208, 50 (2014).

[125] R. Lucklum, M. Zubtsov and A.Oseev, *Phoxonic crystals-a new platform for chemical and biochemical sensors*, Anal Bioanal Chem. 405, 6497 (2013).

[126] S. Amoudache, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, A. Khater, R. Lucklum and R. Tigrine, *Simultaneous sensing of light and sound velocities of fluids in a two-dimensional phoXonic crystal with defects*, J. Appl. Phys. 115, 134503 (2014).

[127] C. A. Barrios, K. B. Gylfason, B. Sánchez, A. Griol, H. Sohlström, M. Holgado, and R. Casquel, *Slot-waveguide biochemical sensor*, Opt. Express 32, 3080 (2007).

[128] Chung-Yen Chao and L. Jay Guo, *Design and Optimization of Microring Resonators in Biochemical Sensing Applications*, Journal of Lightwane Technology 24, 1395 (2006).

[129] P. R.Villeneuve, S. Fan and J. D. Joannopoulos, *Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tunability, and coupling efficiency*, Phys. Rev. B 54, 7837 (1996).

[130] Zheng Han, *Vers le laser Raman à cristal photonique en filière silicium, thèse d'Université* Paris-Sud XI (2010).

[131] K. M. Mayer and J. H. Hafner, *Localized Surface Plasmon Resonance Sensors*, Chem. Rev. 111, 3828 (2011).

[132] D. E. Feldman, *Critical Exponents of the Random-Field O (N) Model*, Phys. Rev. Lett. 88, 177202 (2002).

[133] G. Raschke, S. Kowarik, T. Franzl, C. Sonnichsen, T. A. Klar and J. Feldmann, *Biomolecular Recognition Based on Single Gold Nanoparticle Light Scattering*, Nano. Lett. 3, 935 (2003).

Chapitre 2

Modélisation de la propagation des ondes par la méthode des différences finies (FDTD)

I- Introduction

La conception de composants à base de cristaux photoniques ou phononiques nécessite l'utilisation d'outils de simulations adaptés. Les simulations numériques sont apparues dans les années 70 grâce aux développements de l'informatique. L'accroissement des puissances de calcul des ordinateurs permet aujourd'hui d'étudier des problèmes que l'on ne pouvait pas aborder autrefois. Les capacités dont les laboratoires de recherche disposent maintenant permettent, en effet, de considérer des situations de plus en plus proches de la réalité.

Les domaines d'utilisation des simulations numériques sont nombreux, ils concernent, pour n'en citer que quelques uns, la mécanique des fluides, la mécanique classique, l'élasticité, la résistance des matériaux, l'électromagnétisme, la physique quantique et autres. Les implications sont importantes aussi bien sur le plan fondamental que sur le plan d'applications. Les simulations permettent, par exemple, de réduire les durées de conception et donc les coûts de fabrication d'un produit, ce qui est très important pour la compétitivité des industries. Sur le plan fondamental, ce sont des simulations qui ont permis récemment de prouver certaines conjectures mathématiques.

Plusieurs méthodes numériques ont été adaptées à l'étude de la propagation des ondes dans les cristaux phononiques et photoniques. On peut citer la méthode des ondes planes PWE (Plane Wave Expansion) issue des techniques de calculs de la physique du solide. Cette méthode est adaptée à la détermination de diagramme de dispersion des structures périodiques de dimensions infinies. La PWE a été largement utilisée en photonique [1-3], puis en phononique [4-6].

Par ailleurs, la méthode des éléments finis (Finite Element Method FEM) [7] est une méthode numérique adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles, appliquée à l'origine à des problèmes de mécanique de structure. Cette méthode est basée sur la description géométrique de la structure sous forme d'un maillage. Les éléments finis présentent des avantages intéressants dont les principaux sont l'utilisation de maillages triangulaires (2D) ou tétraédriques (3D) de dimensions variables pouvant décrire des géométries complexes. Cette méthode a connu un développement très rapide ces dernières années dans le domaine des cristaux phononiques du fait de la rapidité de calcul, en comparaison avec d'autres méthodes.

Dans ce travail, l'accent est mis sur l'une des méthodes numériques les plus utilisées dans le domaine photonique [9-11], à savoir la méthode des différences finies dans le domaine spatial et temporel (ou FDTD Finite Difference Time Domain). La méthode se base sur l'algorithme

proposé par S. Ken. Yee en 1966 [8]. Elle est actuellement très utilisée pour la résolution numérique des équations de Maxwell, basée sur une approximation des champs électriques et magnétiques par un schéma centré d'ordre deux en espace et en temps qui permet de passer des champs continus aux champs discrets dans un volume de l'espace et pendant un intervalle de temps lui même discrétisé. Cette méthode a été adaptée au cas des ondes élastiques se propageant dans les cristaux phononiques au début des années 2000 par l'équipe EPHONI de l'IEMN (université Lille1) [12]. Dans ce chapitre, la présentation de cette méthode est faite sur la base des équations de l'élasticité.

La première partie de ce chapitre sera consacrée à une présentation relativement restreinte de la théorie de la propagation d'ondes élastiques en termes d'équations de propagation. Par la suite, nous présentons la méthode FDTD en considérant un cristal phononique à deux dimensions à partir duquel nous expliciterons les équations permettant d'obtenir les courbes de transmission présentées tout au long de ce travail.

II- Loi de Hooke. Équation d'onde

En dépit de la structure discrète de la matière, on traite certains problèmes à l'échelle macroscopique en assimilant la matière à un milieu continu. Cela signifie que l'observateur peut analyser le comportement d'un matériau à une échelle suffisamment grande pour pouvoir ignorer l'aspect atomique de la matière. Ce choix de modélisation est justifiable et s'applique d'une manière naturelle dans de nombreuses situations physiques comme les cas de la déformation des solides, de l'écoulement de liquide ou encore de la détente des gaz.

Dans ce chapitre nous établirons un milieu élastique en exprimant la loi de Hooke et les équations constitutives, sur la base des tenseurs des déformations et des contraintes pour ce milieu. Ces équations font apparaitre la matrice d'élasticité, dont le nombre de constantes indépendantes dépendent de plusieurs facteurs physiques, y compris de la symétrie cristalline du solide. Nous établissons ensuite l'équation générale de propagation des ondes acoustiques dans un milieu homogène.

II-1 Tenseur des déformations

Sous l'action de forces extérieures, un matériau élastique subit ainsi une déformation où le tenseur des déformations est défini à partir des composantes du gradient du vecteur des déformations $\vec{U}(u_1, u_2, u_3)$ en un point M du milieu.

Considérons un point matériel M de coordonnées x_i qui sous l'action de forces extérieures se déplace en M' de coordonnées, $x_{i'} = x_i + u_i$, si bien que u_i définissent son déplacement selon les directions cartésiennes.

Les éléments du tenseur des déformations s'expriment alors sous la forme [13] :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i + \nabla_i u_l \nabla_j u_l\right) \text{ où i, j =1, 2, 3} \qquad (2.1)$$

Dans le cas des faibles déformations, le déplacement u_i est faible, et on peut donc négliger le deuxième terme de couplage de l'équation (2.1). Ainsi, pour les faibles déformations, les éléments de ce tenseur peuvent s'écrire :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i\right) \qquad (2.1a)$$

Où ∇_i est l'opérateur gradient qui s'exprime, en coordonnées cartésiennes, par :

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \text{ où i= 1, 2, 3}$$

Les composantes du tenseur des déformations (2.1) peuvent s'écrire en indices contractés d'après la règle de Voigt (voir tableau 1).

Tableau 1 : indices contractés

Indices du tenseur : (ij)	11	22	33	23-32	13-31	12-21
Indices contractés : k	1	2	3	4	5	6

Les composantes du tenseur des déformations sont alors :

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{ij} \quad \text{où} \quad k = 1, 2, 3 \quad \text{si } i = j$$

$$\varepsilon_k = 2\varepsilon_{ij} \quad \text{où} \quad k = 4, 5, 6 \quad \text{si } i \neq j$$

Pour une petite déformation, toutes les composantes du tenseur des déformations sont elles aussi petites. Le tenseur ε_{ij} est un tenseur de rang 2 symétrique $(\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji})$. On peut passer d'une représentation matricielle $\varepsilon_{ij}\,(3 \times 3)$ à une représentation vectorielle dans un espace à 6 dimensions, en utilisant la règle de Voigt :

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \Longrightarrow \varepsilon_k = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 = \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_2 = \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_3 = \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{23} \\ \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{13} \\ \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \qquad (2.2)$$

avec k = {1, 2, 3, 4, 5, 6}

II-2 Tenseur des contraintes

Le tenseur des contraintes [en unité de forces par surfaces] dans le milieu est noté σ_{ij}. Etant donné un élément de surface ***ds*** quelconque à l'intérieur du solide, la pression mécanique $\vec{T}$ est un vecteur égal à la force par unité de surface $\vec{T} = \lim_{ds \to 0} \frac{d\vec{F}}{ds}$ exercée par la matière située du coté de la normale unitaire $\vec{n}(n_1, n_2, n_3)$ de l'élément de surface *ds* sur la matière située de l'autre côté (Figure 1) [14]. Dans un solide, à la différence d'un fluide, des efforts de cisaillement se transmettent à travers une surface, la pression mécanique n'est donc pas nécessairement parallèle à $\vec{n}$. Comme son module et sa direction dépendent de l'orientation de l'élément ***ds***, la pression mécanique est notée :

$$\vec{T}(\vec{n}) = \lim_{ds \to 0} \left(\frac{d\vec{F}}{ds} \right) \tag{2.3}$$

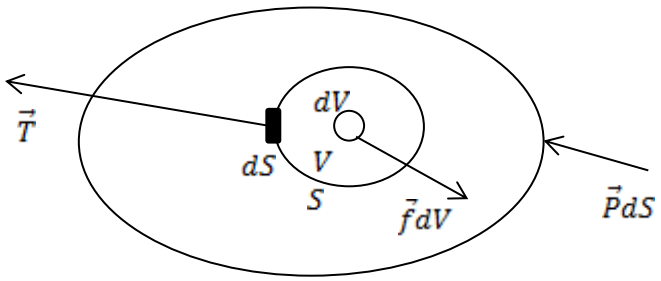


Figure 1 : Equilibre d'un volume intérieur au solide.

L'approche pour définir le tenseur des contraintes σ_{ij}, consiste à écrire les conditions d'équilibre d'un volume intérieur V au solide, soumis d'une part à des forces appliquées sur sa surface avec une densité P_i et d'autre part, à une densité de force f_i par unité de volume (Figure 1). Ces actions se transmettent de proche en proche par les forces de liaisons atomiques dont le rayon d'action, de l'ordre de la distance interatomique, est très petit du point de vue macroscopique. Il s'ensuit que la matière entourant un volume donné n'agit sur celui-ci que par la surface qui le limite. La résultante $\vec{F}$ des forces exercées sur le volume V

est la somme des pressions mécaniques $\vec{T}(\vec{n})$ sur sa surface et des forces exercées dans son volume :

$$F_i = \int_s T_i(\vec{n})ds + \int_V f_i dV = 0 \tag{2.4}$$

D'après le théorème de Green [14], en posant $f_i = -\nabla_i \sigma_{ij}$, on obtient :

$$\int_V f_i \, dV = \int_V \nabla_i \, \sigma_{ij} \, dV = \int_S \sigma_{ij} \, n_j \, ds \tag{2.5}$$

D'où la relation :

$$\int_s T_i(\vec{n})ds = \int_S \sigma_{ij} \, n_j \, ds \tag{2.6}$$

Cette relation, avec sommation sur l'indice muet *j*, exprime la pression mécanique $\vec{T}_i(\vec{n})$sur la surface d'orientation quelconque $\vec{n}$ en fonction des 9 grandeurs notées σ_{ij}. Ce tenseur des contraintes étant symétrique, ses composantes s'expriment de 6 composantes indépendantes :

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \Longrightarrow [\sigma_k] = \begin{bmatrix} \sigma_1 = \sigma_{11} \\ \sigma_2 = \sigma_{22} \\ \sigma_3 = \sigma_{33} \\ \sigma_4 = 2\sigma_{23} \\ \sigma_5 = 2\sigma_{13} \\ \sigma_6 = 2\sigma_{12} \end{bmatrix} \tag{2.7}$$

avec k = {1, 2, 3, 4, 5,6}.

De manière générale, on conçoit que l'état de tension d'un corps est fonction de l'état de déformation et d'autres caractéristiques non-géométriques telles que la température, le temps, etc $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\vec{r}, \varepsilon_{ij}, T, t, ...)$.

Dans notre travail nous limitons au cas isotherme qui est donné par:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\vec{r}, \varepsilon_{ij}) \tag{2.8}$$

II-3 Tenseur d'élasticité-Loi de Hooke

La relation de linéarité entre les tenseurs des déformations et des contraintes ε_{ij} et σ_{ij} définit un tenseur du 4ème ordre C_{ijkl} appelé le tenseur d'élasticité. La relation générale entre contraintes et déformations s'écrit :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\,\varepsilon_{kl} + termes\ d'ordres\ supérieurs \qquad (2.9)$$

Où le premier terme du développement constitue la loi de Hooke linéaire

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\,\varepsilon_{kl} \qquad (2.10a)$$

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\,\sigma_{kl} \qquad (2.10b)$$

Les relations de Hooke, (2.10), constituent des relations de cause à effet.

Dans ce travail de thèse nous nous restreignons au premier ordre de la loi de Hooke. Compte tenu des propriétés de symétrie des tenseurs des déformations et des contraintes, le tenseur des constantes élastiques est également symétrique et on peut permuter respectivement les 2 premiers et les 2 derniers indices des C_{ijkl}, d'où la possibilité d'introduire des coefficients d'élasticité à 2 indices $C_{\alpha\beta}$ avec la convention de W. Voigt (α et β variant de 1 à 6) de contraction des indices adoptés pour σ_{ij} et ε_{kl} d'où la règle de correspondance $C_{\alpha\beta} = C_{ijkl}$. Autrement dit, parmi les 81 composantes du tenseur C_{ijkl} seuls 21 composantes sont indépendantes. Le recours aux notations de W. Voigt, imposent que l'ensemble des matrices carrées symétriques d'ordre 2 forment un espace vectoriel de dimensions six comme défini par (2.2) et (2.7). La relation peut s'écrire alors au premier ordre :

$$\sigma_\alpha(1\times 6) = C_{\alpha\beta}(6\times 6)\varepsilon_\beta(1\times 6) \qquad (2.11)$$

$$\begin{bmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\\ \sigma_4\\ \sigma_5\\ \sigma_6\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16}\\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26}\\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{35}\\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{45}\\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56}\\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ \varepsilon_4\\ \varepsilon_5\\ \varepsilon_6\end{bmatrix}$$

Voyons à présent comment la matrice $c_{\alpha\beta}$ peut être simplifiée compte tenu des propriétés de symétrie du milieu.

Plaçons-nous dans un milieu à symétrie cubique. Dans ce cas précis, la plupart des éléments $c_{\alpha\beta}$ sont nuls : il ne reste que 3 éléments indépendants à connaître (c_{11}, c_{12}, c_{44}) pour déterminer les propriétés élastique du milieu.

La matrice $c_{\alpha\beta}$ s'écrit :

$$c_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix}$$

Si en plus le milieu est isotrope on a : $c_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}$ et il ne reste donc plus que 2 coefficients élastiques indépendants.

En conclusion, le tenseur des contraintes définit les six actions du point de vue de forces par unité de surface à un point donné du matériau élastique (trois contraintes normales et trois contraintes de cisaillement). Le tenseur des déformations, quant à lui, correspond à trois allongements et trois variations d'angles.

II-4 Equation d'onde

Lors de la propagation d'une onde élastique le mouvement du milieu est donné par le vecteur déplacement $\vec{u}$ de chaque point matériel de ce milieu. La densité de force (par unité de volume) du solide soumis aux contraintes internes variables lors du passage de l'onde a pour composantes [14] :

$$f_i = \nabla_j \, \sigma_{ij} \qquad (2.12)$$

Compte tenu de la loi de Hooke, qui relie les tenseurs des contraintes et des déformations, on est conduit à l'équation du mouvement :

$$\rho \ddot{u}_i = \nabla_j \left(C_{ijkl} \, \varepsilon_{kl} \right) \qquad (2.13)$$

Pour un matériau homogène le tenseur d'élasticité est constant. De plus, on peut exprimer le tenseur des déformations en fonctions du vecteur déplacement conformément à (2.1). On obtient alors l'équation de propagation sous la forme :

$$\rho\ddot{u}_i = \frac{1}{2} C_{ijkl} \nabla_j (\nabla_k u_l + \nabla_l u_k + \nabla_k u_m \nabla_l u_m) \quad (2.14)$$

En utilisant la symétrie k ↔ 1 , des composantes du tenseur d'élasticité on trouve :

$$\rho\ddot{u}_i = C_{ijkl} \left(\nabla_j \nabla_k u_l + \nabla_j \nabla_k u_m \nabla_l u_m\right) \quad (2.15)$$

On remarque, que l'équation des ondes acoustiques en termes de champ de déplacement n'est pas linéaire. Toutefois, si ces déplacements sont de faibles amplitudes (acoustiques linéaire), nous pouvons nous limiter au premier terme et écrire d'après Landau, Lifshitz [13] :

$$\rho\ddot{u}_i = C_{ijkl} \nabla_j \nabla_k u_l \quad (2.16)$$

A partir de ces équations de mouvement qui régissent la propagation des ondes élastiques dans ce milieu, la FDTD permet de rapprocher les solutions champ de déplacement et contraintes en se basant sur un développent en différences finies des dérivées partielles qui interviennent dans les équations en question.

Afin de comprendre le principe de la FDTD pour l'étude des cristaux phononiques, nous allons l'appliquer à l'étude d'un cristal phononique à deux dimensions, l'équation (2.10a) s'écrivant alors :

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij}\, \varepsilon_j \quad (2.17)$$

avec $\varepsilon_1 = \frac{\partial u_x}{\partial x}$, $\varepsilon_2 = \frac{\partial u_y}{\partial y}$, $\varepsilon_3 = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}$ et $\sigma_1 = \sigma_{xx}$, $\sigma_2 = \sigma_{yy}$ $\sigma_3 = 2\sigma_{xy}$

L'équation du mouvement (2.13) s'écrit comme suit :

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.18)$$

Où ρ est la masse volumique et v_i (i = x, y) est la composante de la vitesse telle que :

$$v_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} \quad (2.19)$$

III- La méthode FDTD pour l'étude des cristaux phononiques

Il s'agit de modéliser un problème de transmission d'une onde élastique à travers une structure constituée au minimum de deux matériaux et faisant intervenir des objets

périodiques dans une matrice. Ce type d'objet est très difficile à modéliser : la description de la structure doit en effet tenir compte de la globalité de l'objet tout en respectant les détails fins le constituant, principalement au niveau des interfaces. La méthode des différences finies (FDTD) a été introduite pour les cristaux phononiques par Tanaka et al. [15,16] pour la dispersion et par Sigalas et Garcias [17,18] pour la transmission. Ces auteurs ont montré l'efficacité de la méthode tant pour le calcul du coefficient de transmission que pour celui des courbes de dispersion des cristaux phononiques [19-22]. Avec les bonnes conditions de convergence, les résultats concordent parfaitement avec ceux de la PWE dans la détermination des bandes interdites. Le principe de la méthode est de discrétiser les équations d'élasticité dans le domaine temporel et spatial. Il est alors possible de calculer les champs de déplacement associés à une onde acoustique en fonction du temps et en tout point de l'espace discrétisé selon un maillage très fin. Elle propose de passer par une discrétisation des opérateurs aux dérivées partielles plutôt que par la diagonalisation de matrices comme pour la méthode des ondes planes ou des éléments finis. L'avantage de cette méthode réside dans la simplicité de sa mise en œuvre et la connaissance de toutes les composantes des champs de déplacement à tous les instants et dans tout l'espace. La méthode étant entièrement explicite, elle ne nécessite aucune inversion de matrice et possède de ce fait une bonne efficacité de calcul. Enfin, la FDTD peut reproduire le comportement d'une onde électromagnétique ou acoustique sur une large bande de fréquence par une simple transformée de Fourier. Son principe est très proche des méthodes expérimentales.

Le principe de cette méthode consiste à introduire une excitation dans le système. Puis, on détecte l'évolution de la déformation élastique u(x,y,z,t) et de la vitesse v(x,y,z,t) au cours du temps. Au bout d'un temps suffisant, par transformée de Fourier, on obtient une réponse fréquentielle du système à la déformation initiale. On peut alors obtenir des informations telles que les courbes de dispersion et les coefficients de transmission. Pour la courbe donnant les coefficients de transmission, on normalise la transformée de Fourier du signal transmis par celle obtenue pour le système sans cristal phononique. Comme beaucoup de méthodes de simulation, la méthode FDTD présente des inconvénients, qui sont liés au nombre de ressources informatiques qu'elle requiert, pour connaître en tout point et à chaque instant les composantes du champ de déplacement. En effet, des lors que l'on cherche à modéliser des structures à trois dimensions, les temps de calculs augmentent considérablement. Toutefois, l'évolution des capacités de mémoires, de rapidité des ordinateurs et la parallélisation des codes permet de compenser ces désagréments.

III-1 Discrétisation des équations d'élasticité dans l'espace et de temps

En électromagnétisme, au lieu de discrétiser l'équation de Helmholtz, Yee a proposé en 1966 de discrétiser les équations de Maxwell-Ampère et de Maxwell-Faraday. En élasticité, Tanaka et Sigalas ont discrétisé sur le même principe, les équations d'élasticité en 1999. Cette discrétisation s'avère numériquement très robuste et permet d'obtenir simultanément toutes les composantes des champs de déplacements. La discrétisation des équations d'élasticité se fait aussi bien dans le temps que dans l'espace. Une fenêtre spatiale de travail, contenant la structure à étudier, est aussi considérée. Cet espace est alors découpé en petits parallélépipèdes (un maillage curviligne est aussi possible) de dimension $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$. Chaque élément spatial (ici un parallélépipède) est caractérisé par une constante et une densité élastiques. Le temps est lui aussi discrétisé en petits intervalles Δt. Les dérivées partielles spatiales et temporelles apparaissant dans les équations d'élasticité sont remplacées par des différences finies centrés [23].

Soit $f(x, y, z, t)$ une fonction qui représente une composante du vecteur vitesse $\vec{v}$ ou de la contrainte $\vec{\sigma}$. Après discrétisation, la fonction f évaluée au nœud de coordonnées (i, j, k) et à l'instant n est noté $f^n(i, j, k)$ et s'écrit :

$$f(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = f^n(i, j, k) \qquad (2.20)$$

où i, j, k et n sont des entiers et $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ correspondent aux pas spatiaux utilisés dans les directions x, y, z et Δt au pas temporel.

Ainsi, on définit les différences centrées dans l'espace (ici, selon la variable x) par :

$$\frac{\partial f^n(i,j,k)}{\partial x} = \frac{f^n\left(i+\frac{1}{2},j,k\right) - f^n\left(i-\frac{1}{2},j,k\right)}{\Delta x} + 0(\Delta x)^2 \qquad (2.21)$$

et dans le domaine temporel par :

$$\frac{\partial f^n(i,j,k)}{\partial t} = \frac{f^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - f^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)}{\Delta t} + 0(\Delta t)^2 \qquad (2.22)$$

III-1-1Discrétisation temporelle

Si on applique ce raisonnement pour le calcul des vitesses et en supposant connu le champ de vitesse sur des intervalles de temps demi entier, nous pouvons exprimer la dérivée d'une composante de la vitesse au temps t par :

$$\frac{\partial v_i(t)}{\partial t} = \frac{v_i\left(t+\frac{dt}{2}\right) - v_i\left(t-\frac{dt}{2}\right)}{\Delta t}$$

De même, la dérivée du déplacement sera évaluée sur des demi-intervalles

$$\frac{\partial u_i\left(t+\frac{dt}{2}\right)}{\partial t} = v_i\left(t+\frac{dt}{2}\right)$$

Ce qui implique de connaître à son tour le champ de déplacement sur des intervalles de temps entiers.

$$\frac{\partial u_i\left(t+\frac{dt}{2}\right)}{\partial t} = \frac{u_i\left(t+\frac{dt}{2}+\frac{dt}{2}\right) - u_i\left(t+\frac{dt}{2}-\frac{dt}{2}\right)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial u_i\left(t+\frac{dt}{2}\right)}{\partial t} = \frac{u_i(t+dt) - u_i(t)}{\Delta t}$$

D'où les expressions discrétisées de la vitesse et de sa dérivée intervenant dans les équations (2.18) et (2.19)

$$v_i\left(i,j,t+\frac{1}{2}\right) = \frac{u_i(i,j,t+1) - u_i(i,j,t)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial v_i(i,j,t)}{\partial t} = \frac{v_i\left(i,j,t+\frac{1}{2}\right) - v_i\left(i,j,t-\frac{1}{2}\right)}{\Delta t}$$

III-1-2 Discrétisation spatiale

Quant à la discrétisation spatiale, le domaine 2D est maillé selon une grille de taille $n_x dx$ et $n_y dy$ (n_x (resp. n_y) étant le nombre de pas dx (resp. dy). On note i, j les indices associés aux coordonnées spatiales x, y et t l'indice temporel. Pour chaque pas temporel t, les matrices **u**(i, j, t) = **u**(idx, jdy, tdt) et **v**(i, j, t) = **v**(idx, jdy, tdt) seront évaluées avec i allant de 1 à n_x, j de 1 à n_y et t de 1 à n_t.

Les discrétisations spatiales apparaissent sur les contraintes (2.18) et sur les déplacements (2.19). L'équation (2.18) permet d'écrire, pour la composante x :

$$\frac{\partial v_x}{\partial t}(i,j) = \frac{1}{\rho(i,j)}\left[\frac{\partial \sigma_{xx}(i,j)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}(i,j)}{\partial y}\right]$$

où

$\frac{\partial v_x}{\partial t}(i,j)$ a déjà été discrétisé

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}(i,j) = \frac{\sigma_{xx}\left(i+\frac{1}{2},j\right) - \sigma_{xx}\left(i-\frac{1}{2},j\right)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}(i,j) = \frac{\sigma_{xy}\left(i,j+\frac{1}{2}\right) - \sigma_{xy}\left(i,j-\frac{1}{2}\right)}{\Delta y}$$

La définition des contraintes à partir de l'équation (2.18) nous permet d'obtenir

$$\sigma_{xx}\left(i+\frac{1}{2},j\right) = C_{11}\left(i+\frac{1}{2},j\right)\frac{\partial u_x}{\partial x}\left(i+\frac{1}{2},j\right) + C_{12}\left(i+\frac{1}{2},j\right)\frac{\partial u_y}{\partial y}\left(i+\frac{1}{2},j\right)$$

$$\sigma_{xy}\left(i,j+\frac{1}{2}\right) = C_{44}\left(i,j+\frac{1}{2}\right)\left[\frac{\partial u_x}{\partial y}\left(i,j+\frac{1}{2}\right) + \frac{\partial u_y}{\partial x}\left(i,j+\frac{1}{2}\right)\right]$$

La discrétisation spatiale doit également être appliquée au déplacement :

$$\sigma_{xx}\left(i+\frac{1}{2},j\right) = C_{11}\left(i+\frac{1}{2},j\right)\left[\frac{u_x(i+1,j-u_x(i,j))}{\Delta x}\right] + C_{12}\left(i+\frac{1}{2},j\right)\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right) - u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)}{\Delta y}\right]$$

On déduit :

$$\sigma_{xx}\left(i-\frac{1}{2},j\right)=C_{11}\left(i-\frac{1}{2},j\right)\left[\frac{u_x(i,j-u_x(i-1,j))}{\Delta x}\right]+C_{12}\left(i-\frac{1}{2},j\right)\left[\frac{u_y\left(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)}{\Delta y}\right]$$

Et :

$$\sigma_{xy}\left(i,j+\frac{1}{2}\right)=C_{44}\left(i,j+\frac{1}{2}\right)\left[\left[\frac{u_x(i,j+1)-u_x(i,j)}{\Delta y}\right]+\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)}{\Delta x}\right]\right]$$

$$\sigma_{xy}\left(i,j-\frac{1}{2}\right)=C_{44}\left(i,j-\frac{1}{2}\right)\left[\left[\frac{u_x(i,j)-u_x(i,j-1)}{\Delta y}\right]+\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)}{\Delta x}\right]\right]$$

De façon similaire on peut discrétiser la composante y.

On remarque que le champ de déformation u_x doit être évalué sur des intervalles d'espace entiers alors que u_y doit être évalué sur des intervalles d'espace demi entiers selon le schéma défini sur la figure 2. Il en va de même pour les champs de vitesse v_x et v_y, respectivement, de manière à respecter les égalités :

$$\frac{\partial u_x}{\partial t}(i,j)=v_x(i,j) \text{ et } \frac{\partial u_y}{\partial t}\left(i+\tfrac{1}{2},j+\tfrac{1}{2}\right)=v_y\left(i+\tfrac{1}{2},j+\tfrac{1}{2}\right)$$

Enfin, afin d'évaluer les paramètres élastiques aux interfaces (ρ et c_{ij}) sur des demi intervalles, on utilisera des moyennes géométriques sur les nœuds voisins de la grille, comme dans l'exemple suivant :

$$\rho\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)=\sqrt[4]{\rho(i,j)\rho(i+1,j)\rho(i,j+1)\rho(i+1,j+1)}$$

En résumé, la discrétisation implique que les composantes soient calculées sur le maillage suivant :

$$u_x(i,j),v_x(i,j),u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right),v_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right),\sigma_{xx}\left(i+\frac{1}{2},j\right),\sigma_{yy}\left(i+\frac{1}{2},j\right),\sigma_{xy}\left(i,j+\frac{1}{2}\right)$$

III-2 Schéma de Yee pour les équations d'élasticité

L'algorithme de Yee est basé sur le décalage en espace et en temps résultant du calcul des composantes des champs électromagnétiques. En élasticité, la figure 2 représente le positionnement des champs de déplacement, de vitesse et de contraintes acoustiques. Ainsi,

chaque composante va être définie sur un réseau entier ou demi entier à la fois dans l'espace, résultat de la discrétisation spatiale et temporelle des équations de propagation.

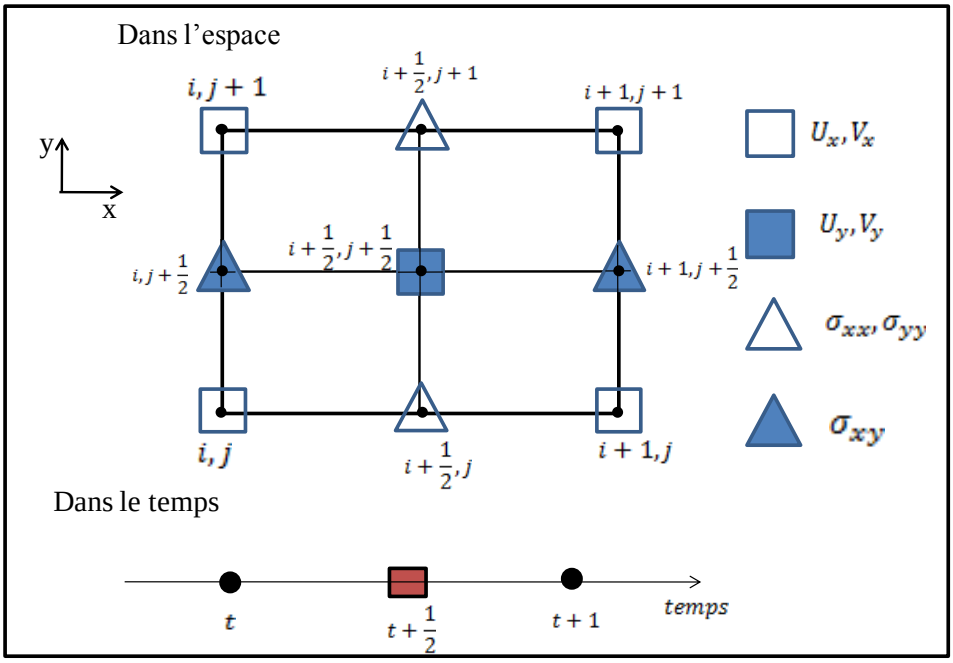


Figure 2 : Définition des réseaux de discrétisation spatial et temporel des composantes élastiques des champs des déplacements, des vitesses et des contraintes.

On utilise un algorithme de récurrence permettant de déterminer les valeurs de la vitesse et du déplacement à l'instant suivant connaissant l'état initial à t = 0. Ainsi, chaque pas temporel devient la condition initiale de l'incrémentation suivante. La récurrence s'appuie sur la connaissance des composantes u_x et u_y du champ de déplacement en tout point M de la structure à l'instant t. L'équation (2.17) permet de calculer les contraintes correspondantes, en tout point M, à ce même instant t. Puis, à l'aide de l'équation (2.18), on détermine la vitesse $v_i(x, y, t+dt)$. Enfin par une intégrale dans le temps on extrait $u_i(x, y, t+dt)$ correspondant au déplacement à l'instant t+dt. On incrémente alors la boucle de récurrence comme représentée sur la figure 3 ci-dessous.

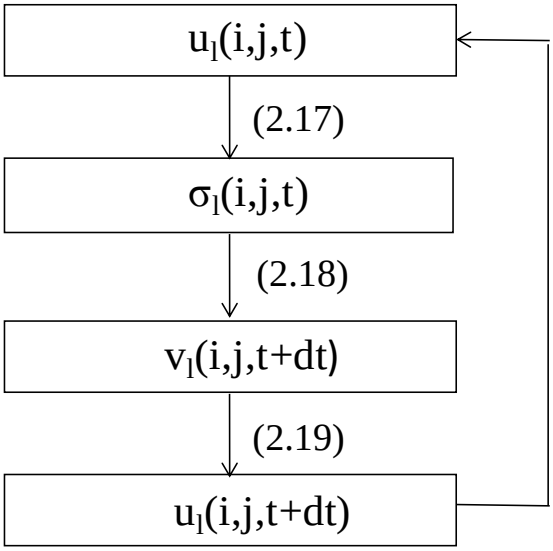


Figure 3 : Organigramme de récurrence pour le calcul des champs de déplacements à l'instant t+dt à partir de l'instant t.

III-3 Conditions de stabilité

La stabilité numérique du calcul FDTD a fait l'objet d'études dès l'apparition de cette méthode numérique [23], les critères de stabilité établis dans le cas d'un maillage respectant le schéma de Yee, se résument aux deux conditions suivantes [24] :

Critère spatial $Min(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda}{16}$

Critère temporel $\Delta t \leq \frac{1}{V_{max}\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{(\Delta y)^2}+\frac{1}{(\Delta z)^2}}}$ où V_{max} est la vitesse maximale de propagation dans le milieu étudié. En général, en photonique, $V_{max} = c$, c étant la vitesse de la lumière dans le vide. En phononique, $V_{max} = C_l$ où C_l est la vitesse longitudinale maximale dans le milieu homogène incident.

II-4 Application aux calculs des coefficients de transmission

La transmission est la capacité de l'onde à traverser une structure périodique à une fréquence donnée. Elle se calcule en mettant en place une source générant des ondes à large bande de fréquences qui vont traverser le cristal phononique ou photonique pour être interceptées à leur sortie en enregistrant les valeurs de champ de déplacement ou les champs électromagnétiques en fonction du temps. Afin de comprendre le processus de calcul du coefficient de transmission, nous prenons le cas d'une structure 2D (figure 4). L'espace est délimité en trois zones : deux zones homogènes séparées par le cristal phononique. La première, située avant le

cristal phononique est celle de l'excitation à partir de laquelle une onde acoustique progressive est lancée. La direction y correspond alors à la direction de propagation de l'onde élastique. La seconde zone, après le cristal phononique, est celle de la détection où est collecté le champ de déplacement en fonction du temps. Les composantes des déplacements sont progressivement enregistrées au cours du temps au niveau du détecteur et converties en fréquence par transformée de Fourier. Enfin, la normalisation de ces courbes avec l'onde incidente permet d'obtenir la courbe d'évolution des coefficients de transmission en fonction de la fréquence.

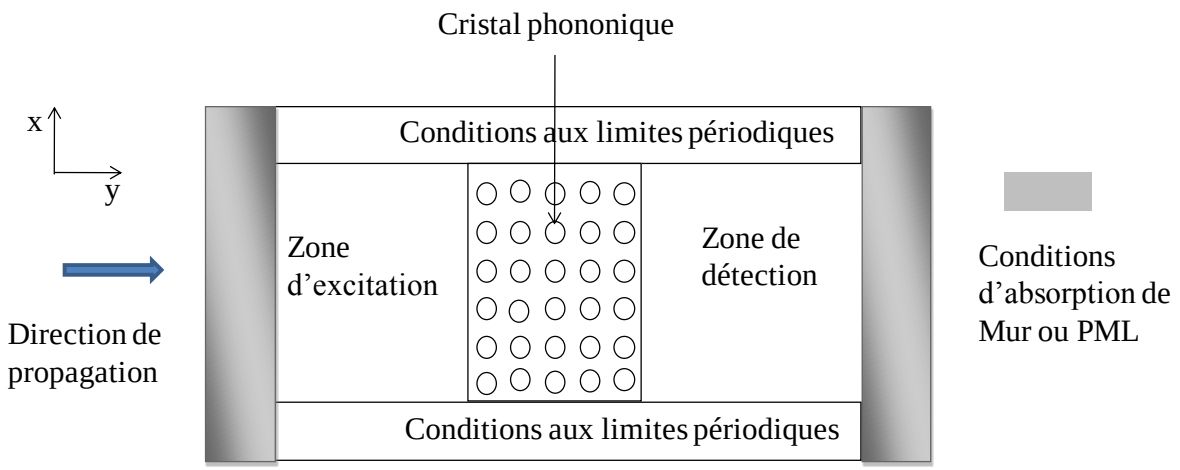


Figure 4 : Schéma d'un cristal phononique fini à deux dimensions pour le calcul des courbes de coefficients de transmission.

III-4-1 Conditions d'absorption aux frontières

Les ressources informatiques étant finies, il est nécessaire de restreindre spatialement le domaine de calcul. Cette restriction ne permet plus d'appliquer les équations en bord du domaine, en général tous les champs situés en bord du domaine ne peuvent pas ainsi être calculés avec les équations classiques FDTD. Des conditions de bord sont nécessaires pour éviter les réflexions parasites qui peuvent apparaitre en raison de la dimension finie de la fenêtre de calcul. Il faut faire en sorte que la fenêtre de calcul devienne une chambre anéchoïque pour l'onde élastique ou électromagnétique qui s'y propage.

Une première solution est de fixer les composantes de champ à une valeur nulle aux bords du domaine et de ne pas appliquer l'algorithme de base. Des réflexions non physiques apparaissent alors sur ces bords et perturbent fortement le comportement de la structure. Il faut donc utiliser un algorithme pour ces composantes de bord qui visent à réduire ces

réflexions. L'utilisation de conditions aux limites performantes est finalement la difficulté majeure de la mise en œuvre de cette technique de calcul. Plusieurs méthodes existent avec des philosophies différentes [23].

III-4-1-1 Conditions de Mur

Les conditions aux limites dites conditions de Mur [25] sont imposées le long de la direction de propagation. Elles permettent notamment de simuler un milieu de propagation infini et de s'affranchir de réflexions parasites aux extrémités de la cellule. Nous cherchons donc à appliquer les conditions de Mur aux extrémités y telles que j = 1 et j = n_y sur le déplacement **u**(i, j). Pour cela, il faut exprimer la déformation sur le plan j = 1 (respectivement j = n_y) et en un instant t+dt en fonction des déformations existantes au temps précédent et à la position précédente, c'est à dire à j = 2 (respectivement j = n_y-1). Pour la composante du champ de déplacement u_y, ces conditions s'écrivent de la façon suivante [18] :

$$U_y(1,j,k+1)=U_y(2,j,k)+\frac{c\Delta t-\Delta y}{c\Delta t+\Delta y}\left[U_y(2,j,k+1)-U_y(1,j,k)\right]$$

$$U_y(n_x,j,k+1)=U_y(n_x-1,j,k)+\frac{c\Delta t-\Delta y}{c\Delta t+\Delta y}\left[U_y(n_x-1,j,k+1)-U_y(n_x,j,k)\right]$$

où c est la vitesse transverse ou longitudinale de l'onde dans le matériau constitutif de la matrice.

Cette méthode présente le défaut que ces équations ne sont valables que pour les ondes arrivant sous incidence normale. Cette condition est respectée dans le cas des ondes planes ou des ondes sphériques considérées planes, à savoir loin de la source. Dans le cas contraire, des réflexions parasites se produisent si on s'en écarte.

III-4-1-2 Conditions PML (Perfectly Matched Layers)

L'une des solutions la plus efficace et la plus utilisée est la condition aux limites dite PML (Perfect Matching Layer) qui consiste à ajouter autour de la fenêtre de calcul des couches absorbantes. La formulation mathématique de la PML en FDTD a été introduite pour la première fois par Bérenger [26] pour les ondes électromagnétiques régies par les équations de Maxwell. Elles permettent de descendre à des réflexions en amplitude de l'ordre de 10^{-5}. Elle a été ensuite reformulée par Chew et Liu [27] pour les ondes élastiques en ajoutant une propriété d'amortissement au niveau des discrétisations FDTD du domaine PML.

Deux conditions sont à respecter par la PML : la première réside dans le fait qu'elle doit présenter une adaptation d'impédance parfaite au niveau de l'interface entre les deux milieux. Dans ce cas, l'onde n'est pas réfléchie à l'interface entre les deux milieux et s'atténue dans la partie absorbante. La seconde condition est liée à l'épaisseur de la couche absorbante qui doit être suffisamment grande pour éviter les réflexions aux bords des PML (tout en restant plus petite pour ne pas trop alourdir les calculs).

-Equations d'évolution dans un milieu PML

Il faut introduire, dans le système d'équation, un coefficient d'absorption dans la zone de la PML. On appelle le facteur d'atténuation, $d(d^x, d^y)$. Le principe de la méthode consiste tout d'abord en une décomposition des déplacements et des contraintes selon les directions x et y, afin de traiter séparément l'absorption dans chacune des directions, soit :

$$u_x = u_x^x + u_x^y,\ u_y = u_y^x + u_y^y,\ \sigma_{xx} = \sigma_{xx}^x + \sigma_{xx}^y,\ \sigma_{yy} = \sigma_{yy}^x + \sigma_{yy}^y,\ \sigma_{xy} = \sigma_{xy}^x + \sigma_{xy}^y$$

Ainsi, les équations (2.18) et (2.17) peuvent s'écrire, respectivement, sous formes :

$$\rho\frac{\partial v_x^x}{\partial t} + d^x v_x^x = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \text{ et } \rho\frac{\partial v_x^y}{\partial t} + d^y v_x^y = \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}$$

Pour la composante v_y :

$$\rho\frac{\partial v_y^x}{\partial t} + d^x v_y^x = \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} \text{ et } \rho\frac{\partial v_y^y}{\partial t} + d^y v_y^y = \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}$$

Pour les équations sur les contraintes :

$$\frac{\partial \sigma_{xx}^x}{\partial t} + d^x \sigma_{xx}^x = C_{11}\frac{\partial v_x}{\partial x} \text{ et } \frac{\partial \sigma_{xx}^y}{\partial t} + d^y \sigma_{xx}^y = C_{12}\frac{\partial v_y}{\partial y}$$

$$\frac{\partial \sigma_{yy}^x}{\partial t} + d^x \sigma_{yy}^x = C_{12}\frac{\partial v_x}{\partial x} \text{ et } \frac{\partial \sigma_{yy}^y}{\partial t} + d^y \sigma_{yy}^y = C_{22}\frac{\partial v_y}{\partial y}$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}^y}{\partial t} + d^y \sigma_{xy}^y = C_{44}\frac{\partial v_x}{\partial y} \text{ et } \frac{\partial \sigma_{xy}^x}{\partial t} + d^x \sigma_{xy}^x = C_{44}\frac{\partial v_y}{\partial x}$$

Ainsi, dans la zone PML, la déformation que l'on peut traiter comme une onde, n'est pas réfléchie, mais s'atténue dans la partie absorbante. Toutefois cette méthode d'adaptation d'impédance n'est valable qu'en incidence normale, ce qui veut dire qu'en incidence oblique

des réflexions apparaissent à l'interface entre les deux milieux. Afin de pallier à ce problème, on utilise l'astuce développée par Bérenger [26] qui consiste à rendre le milieu absorbant et artificiellement biaxes. L'absorption est alors choisie non nulle que suivant l'axe normal à l'interface entre les deux milieux (Figure 5) et sera également nulle parallèlement à celle-ci. De plus, l'onde transmise est fictivement décomposée en deux ondes :

i) une onde à incidence normale, qui vérifie la condition précédente et qui n'est pas réfléchie à l'interface entre le milieu non absorbant et le milieu absorbant.

ii) une onde à incidence rasante pour laquelle aucune absorption n'apparait. Cette onde ne subit par conséquence aucune réflexion.

Il suffit donc de rajouter des couches de type PML tout autour du domaine de calcul pour absorber sans réflexions une onde incidente arrivant avec une incidence quelconque. L'épaisseur de cette couche peut être choisie aussi grande que nécessaire pour absorber l'onde incidente. Une condition de mur métallique peut alors être imposée en limite de PML sans réflexions conséquentes d'énergie dans le domaine de calcul. Ainsi, en ajoutant des couches PML tout autour du domaine de calcul, on peut absorber sans réflexion une onde arrivant sous incidence quelconque.

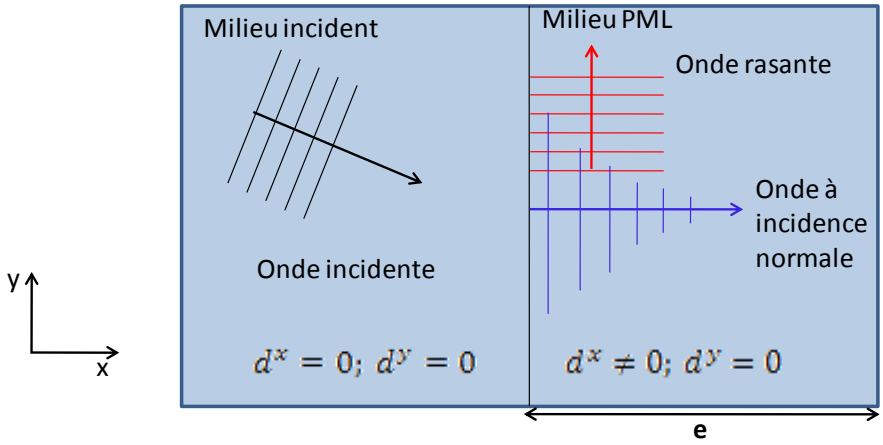


Figure 5 : Principe de fonctionnement d'une PML suivant la méthode de Bérenger.

Lors du passage de l'onde du milieu modélisé à un milieu PML, il peut toutefois subsister un résidu de réflexion, causé par l'absorption brutale de l'onde. De ce fait il est usuel d'opérer à une absorption progressive de l'onde en loi de puissance, ce qui se traduit mathématiquement par l'équation suivante :

$$d^{l} = d^{\max}\left(\frac{l}{e}\right)^{n}$$

avec :

d^{l} : facteur d'atténuation.

$d^{\max}$: facteur d'atténuation maximal.

l : profondeur de pénétration dans la couche PML.

e : profondeur totale la couche PML.

n : ordre de croissance du facteur d'atténuation, cet ordre est souvent choisi entre 2 et 5.

En résumé, la PML comme son nom l'indique est une sorte de matériau multicouche dont l'indice de la première couche est parfaitement adapté à celui de la fenêtre de calcul tout en présentant un terme d'absorption qui va augmenter progressivement au fur et à mesure que l'on s'écarte de l'interface entre la fenêtre principale de calcul de la PML.

VI- Conclusion

La méthode FDTD est une méthode bien adaptée pour la modélisation des cristaux photoniques et phononiques principalement parce qu'elle permet un accès aux caractéristiques dynamiques des structures (transmission, réflexion, localisation des champs, facteur de qualité de résonateurs,...). Elle permet l'utilisation de sources de profils spatiaux (modes guidés, ondes planes, source ponctuelle) et des profils temporels (harmoniques, impulsions) divers et variés. Les conditions aux limites de type PML sont adaptées aux fortes diffractions qui apparaissent dans les cristaux photoniques et phononiques. C'est donc un outil de choix pour l'expérimentateur qui veut mieux comprendre les significations physiques de spectres expérimentaux de transmission ou de réflexion. Dans certaines situations, la FDTD dépasse les limites de la PWE en permettant, par exemple, l'étude de systèmes phononiques impliquant des éléments fluides (où la vitesse transverse est nulle) dans une matrice fluide. La FDTD a de surcroît montré son efficacité pour différents types de systèmes périodiques solide-solide, solide-liquide et solide-vide. Toutefois, cette méthode devient coûteuse en temps de calculs et en mémoire pour le calcul des structures à trois dimensions et il devient difficile d'obtenir une bonne convergence des résultats.

Bibliographie

[1] M. Plihal and A. A. Maradudin, *Photonic band structure of two-dimensional systems: The triangular lattice*, Phys. Rev. B 44, 8565 (1991).

[2] P. R. Villeneuve and M. Piché, *Photonic band gaps in two-dimensional square and hexagonal lattices*, Phys. Rev. B 46, 4969 (1992).

[3] K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis, *Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures*, Phys. Rev. Lett. 65, 3152 (1990).

[4] J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, M. S. Kushawaha, and P. Halevi, *Complete acoustic band gaps in periodic fibre reinforced composite materials: the carbodepoxy composite and some metallic systems*, J. Phys : Condens. Matter 6, 8759 (1994).

[5] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Attenuation of multiple-scattered sound*, Europhys. Lett. 36**,** 241 (1996).

[6] Y. Tanaka and S-I. Tamura, *Surface acoustic waves in two-dimensional periodic elastic structures*, Phys. Rev. B 58, 7958 (1998).

[7] A Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi and V. Laude, *Complete band gaps in two-dimensional phononic crystal slabs*, Phys. Rev. E 74**,** 046610 (2006).

[8] K. S. Yee, *Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media*, IEEE Trans. Antennas Propagat. 14, 302 (1966).

[9] J. B. Pendry and A. MacKinnon, *Calculation of Photon Dispersion Relations*, Phys. Rev. Lett. 69, 2772 (1992).

[10] C. T. Chan, Q. L. Yu and K. M. Ho, *Order-N spectral method for electromagnetic waves* Phys. Rev. B 51, 16635 (1995).

[11] K. Sakoda and J. Kawamata, Novel *approach to photonic bands with frequency-dependent dielectric constants*, Optics Express 3, 12 (1998).

[12] J. O. Vasseur, P.A. Deymier, B. Chenni, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski and D. Prevost, *Experimental and Theoretical Evidence for the Existence of Absolute Acoustic Band Gaps in Two-Dimensional Solid Phononic Crystals*, Phys. Rev. Lett. 86, 3012 (2001).

[13] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Theory of Elasticity, Pergamon, London, 1959.

[14] M. Mallah, *Les Ondes Elastiques De Surfaces Dans Les Matériaux Anisotropes Semi-Infini Ou Multicouches*. Thèse de doctorat, université du Maine Le Mans (1998).

[15] Y. Tanaka and S. Tamura, *Acoustic stop bands of surface and bulk modes in two-dimensional phononic lattices consisting of aluminum and a polymer*, Phys. Rev. B 60, 13294 (1999).

[16] Y. Tanaka, Y. Tomoyasu and S-I. Tamura, *Band structure of acoustic waves in phononic lattices: Two-dimensional composites with large acoustic mismatch*, Phys. Rev. B 62, 11 (2000).

[17] D. García-Pablos, M. Sigalas, F. R. Montero de Espinosa, M. Torres, M. Kafesaki, and N. García. *Theory and Experiments on Elastic Band Gaps*, Appl. Phys. Lett., 84, 19 (2000).

[18] M. M. Sigalas and N. García, *Theoretical study of three dimensional elastic band gaps with the finite-difference time-domain method*, J. Appl. Phys. 87, 6 (2000).

[19] T. Miyashita and C. Inoue, *Numerical Investigation Transmission and Waveguide Properties of Sonic by Finite-Difference Time-Domain Method*, Jpn. J. Appl. Phys. 40, 3488 (2001).

[20] Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani and V. Laude, *Guiding and bending of acoustic waves in highly confined phononic crystal waveguides*, Appl. Phys. Lett. 84, 4400 (2004).

[21] J-H. Sun and T-T. Wu, *Propagation of surface acoustic waves through sharply bent two-dimensional phononic crystal waveguides using a finite-difference time-domain method*, Phys. Rev. B 74, 174305 (2006).

[22] J-H. Sun and T-T. Wu, *Propagation of acoustic waves in phononic-crystal plates and waveguides using a finite-difference time-domain method*, Phys. Rev. B 76, 104304 (2007).

[23] A. Taflove, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*; Artech House: Norwood, MA, (1995).

[24] Jacquier Bernard. *Nano-optique du solide*, Traité EGEM, série optoélectronique Lavoisier (2012).

[25] G. Mur, *Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time Domain Electromagnetic-Field Equations*, IEEE Trans. Electromagn. Compat. 23, 377 (1981).

[26] J. P. Berenger, *A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves*, Journal of Computational Physics 114, 185 (1994).

[27] W. C. Chew and Q. H. Liu, *Perfectly Mached Layers for Elastodynamics: A New Absorbing Boundary Conditions*, J. Comput. Acoust. 4, 341 (1996).

Chapitre 3

Etude de la transmission des ondes élastiques et optiques dans un cristal phononique et photonique mixte ; application au domaine des capteurs

I- Introduction

Les bandes interdites dans les cristaux photoniques ou phononiques résultent de la diffraction des photons ou des phonons lorsque la longueur d'onde est de l'ordre de grandeur du paramètre de maille du cristal. Pour des fréquences choisies à l'intérieur de ces bandes interdites, les photons et les phonons ne se propagent pas à travers le cristal photonique/phononique. Toutefois, de nouveaux états d'énergie peuvent être créés en introduisant des 'défauts' dans le cristal. Ces derniers, identifiés comme des cavités optiques/acoustiques résonantes, permettent de confiner l'énergie électromagnétique ou élastique en introduisant des pics et des chutes d'amplitude dans la signature spectrale. Une utilisation possible de ces fonctions comme détecteurs est possible. Pour cela, les phénomènes de détection sont basés sur la sensibilité des modes localisés à la variation de l'indice de réfraction optique ou acoustique du liquide.

Des capteurs à base de cristaux photoniques à microcavités bidimensionnelles [1-4] ont depuis peu démontré leur aptitude à la fois théorique et expérimentale dans la détection et l'identification d'éléments biochimiques. Cette détection se fait par la mesure du décalage de la longueur d'onde de résonance dans le spectre de transmission en fonction de l'indice de réfraction du liquide. En revanche, ce n'est que très récemment que les cristaux phononiques ont été utilisés comme nouvelle plate-forme de capteurs, exploitant l'effet modal de résonance des ondes ultrasonores [5, 6]. La validation de principe a été démontrée par R. Lucklum et J. Li en 2009 [5], dans un cristal phononique à deux dimensions constitué de trous d'eau dans une matrice d'aluminium et de tungstène. Ces auteurs ont utilisé le cristal phononique pour détecter la vitesse acoustique d'un liquide remplissant les parties creuses de la structure.

Dans ce chapitre, nous étudions théoriquement les transmissions à la fois photonique et phononique à travers un cristal à deux dimensions constitué d'un substrat de silicium percé de trous cylindriques d'air. Nous commencerons d'abord par décrire le cristal périodique, en définissant les paramètres géométriques et physiques de la structure que nous allons étudier. Nous introduirons, au milieu du cristal, un défaut structurel, en remplissant de liquide une rangée de trous d'air (section II). Dans la partie suivante, nous étudierons les propriétés de transmission des ondes élastiques (section III.1) et optiques (section III.2), de manière indépendante ainsi que les propriétés de confinement de ces deux types d'onde à l'intérieur de la ligne de défaut. Dans chacun des cas, nous étudierons les effets des paramètres géométriques de la ligne de liquide sur les modes de résonance. Dans le dernier paragraphe

(IV), les résultats obtenus sur les études phononiques et photoniques nous permettrons de concevoir un capteur à la fois phononique et photonique dont nous définirons la sensibilité aux vitesses du son et de la lumière.

II- Modélisation et paramètres géométriques

Nous nous intéressons à la transmission à travers un cristal périodique formé de trous cylindriques d'air dans un substrat de silicium. Ces inclusions sont disposées selon un réseau carré. La rangée centrale pourra être remplie avec un liquide dont on veut sonder les vitesses acoustique et optique du son et de la lumière. Le rayon de la ligne centrale pourra également être différent des autres. L'objectif est de définir une structure qui devra être fortement sensible à la fois à la variation de l'indice de réfraction et à celui de la vitesse du son des liquides en vue d'être appliquée à la détection d'un grand nombre d'éléments chimiques.
Les simulations numériques sont effectuées à l'aide d'un code de différences finies en temps et en espace (FDTD) à deux dimensions. Comme nous l'avons souligné au chapitre précédent, la méthode FDTD permet d'obtenir les coefficients de transmission et de représenter des cartes de champ à des fréquences monochromatiques choisies. Le schéma de la structure est présenté sur la figure 1. L'axe du cylindre est dirigé selon la direction Z. Dans cette direction, la structure est infinie. Selon la direction x, le cristal est également infini mais périodique. Dans la direction y, la taille est finie et des conditions absorbantes PML sont appliquées aux limites en sortie de la cellule pour éviter les réflexions. Le rayon normalisé des inclusions du cristal est fixé à $r_1/a = 0.25$. Les courbes de transmission seront présentées dans tout ce qui suit en fonction de la fréquence normalisée (sans dimension) $\Omega = \omega a / (2\Pi c) = a / \lambda$ où λ est la longueur d'onde de l'onde considérée, ω sa fréquence (en s^{-1}). En photonique, *c* est la vitesse de la lumière dans le vide et en phononique c représente la vitesse de volume transversale du silicium. Les paramètres physiques des matériaux constituants sont donnés dans le tableau 1.

Tableau 1 : propriétés physiques des matériaux constituants le cristal phoxonique.

	vitesse acoustique longitudinale (m/s)	vitesse acoustique transversale (m/s)	Masse volumique $\rho(Kg/m^3)$	Indice de réfraction
Silicium	8431	5844	2331	3.5
Air	340	0	1300	1
Eau	1490	0	990	1.33

La matrice est constituée de silicium cristallin à symétrie cubique [7] dont les constantes élastiques sont : $C_{11} = 16.56 \times 10^{10} (N/m^2), C_{44} = 7.962 \times 10^{10} (N/m^2)$ et $C_{12} = 6.39 \times 10^{10} (N/m^2)$.

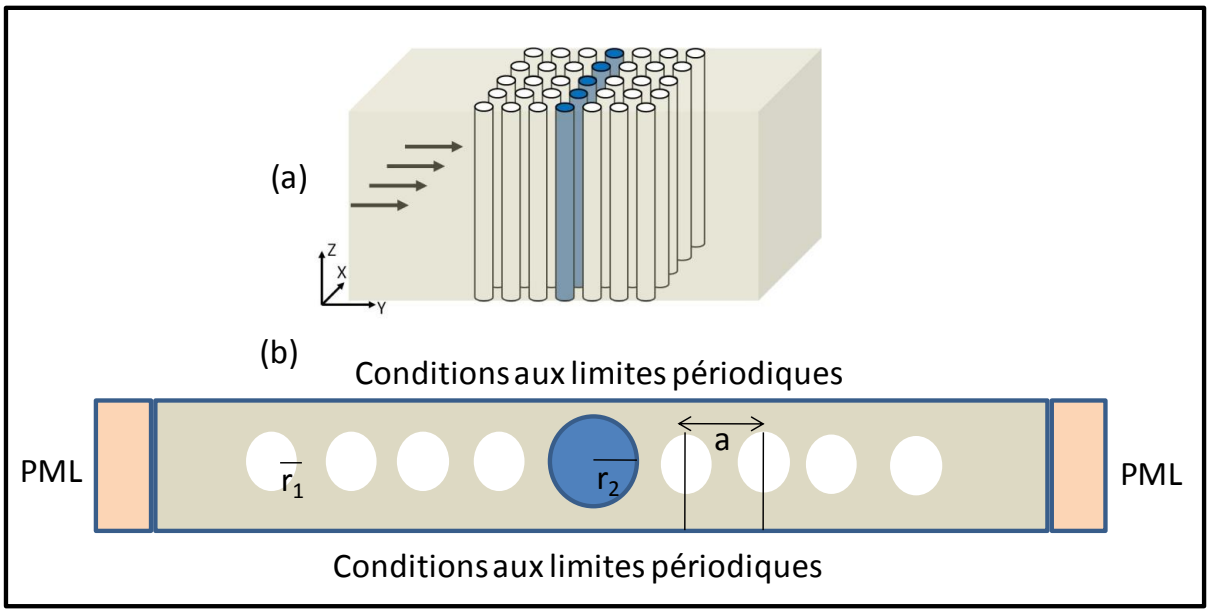


Figure 1 : (a) Représentation schématique d'un cristal phoxonique à 3D contenant une rangée de cylindres remplie d'eau, disposée perpendiculairement à la direction de la propagation. (b) Cellule élémentaire utilisée pour le calcul par FDTD de la transmission des ondes optiques ou acoustiques. Des couches parfaitement absorbantes (PML) sont appliquées dans la direction de propagation y, tandis que des conditions périodiques (PBC) sont appliquées dans la direction x. La ligne de défaut des trous ont un rayon r_2 qui peut être différent du rayon r_1 du cristal de paramètre de maille a.

III- Confinement des ondes phononiques et photoniques

III-1 Etude phononique

III-1-1 Transmission dans le cas d'un cristal phononique parfait

Les ondes acoustiques se propageant à travers le cristal phononique subissent de multiples diffusions et diffractions dues à la présence des inclusions disposées périodiquement. Il en résulte des interférences constructives et destructives, ce qui entraîne l'apparition de l'élément le plus important dans les structures de bandes du cristal phononique, des bandes dites d'arrêt à l'intérieure desquelles le son ne peut pas se propager à travers la structure [8]. Le cristal étudié est constitué de treize rangées de cylindres dans la direction de propagation. Ce choix a été obtenu après une étude de l'influence du nombre de rangées (7, 9 et 11) sur l'atténuation

de l'onde acoustique. En effet, les phénomènes de bandes interdites de type Bragg sont liés aux diffractions multiples encourues par l'onde propagative lors de son incidence sur les éléments individuels constitutifs du réseau. Une augmentation du nombre de diffuseurs conduit à une atténuation plus prononcée du signal pour les fréquences comprises dans la bande interdite [9]. Un nombre important de rangées permet également une meilleure isolation de l'énergie confinée dans les cavités et par conséquent, une amélioration des facteurs de qualité des modes de défauts [10].

Dans ce premier calcul, toutes les inclusions contiennent de l'air et les rayons sont choisis tels que $r_1 = r_2 = 0.25a$. Les pas de discrétisation de l'espace suivant les deux directions x et y sont égaux à $\Delta x = a/90 = \Delta y$, où a est le paramètre de maille, ce qui assurent un nombre suffisant de points pour une bonne convergence spatiale des calculs. Le pas temporel est choisi tel que $\Delta t = \frac{\Delta x}{4C_l}$, c_l étant la plus grande vitesse utilisée dans le modèle. La résolution des équations du mouvement se fera sur une intégration de temps de $t = 2^{22}\Delta t$. Tous les spectres de transmission présentés par la suite sont normalisés par rapport à la vitesse transverse c_t d'un substrat infini de silicium (c_t = 5844 m/s), en absence de trous. La propagation se fait dans le plan (x, y) en tenant compte des déplacements U_x et U_y.

La figure 2b montre la courbe de transmission à travers le cristal parfait en fonction de la fréquence normalisée Ω dans la gamme de fréquences réduites [0, 0.8]. Du fait d'un fort contraste entre les propriétés acoustiques des deux milieux en présence, à savoir le silicium et l'air, la courbe de transmission de ce système met en évidence la présence d'un gap dans la gamme de fréquence [0.495-0.784]. Le gap formé est dû aux réflexions de type Bragg. Cette bande interdite est directionnelle car uniquement présentée selon la direction de propagation y.

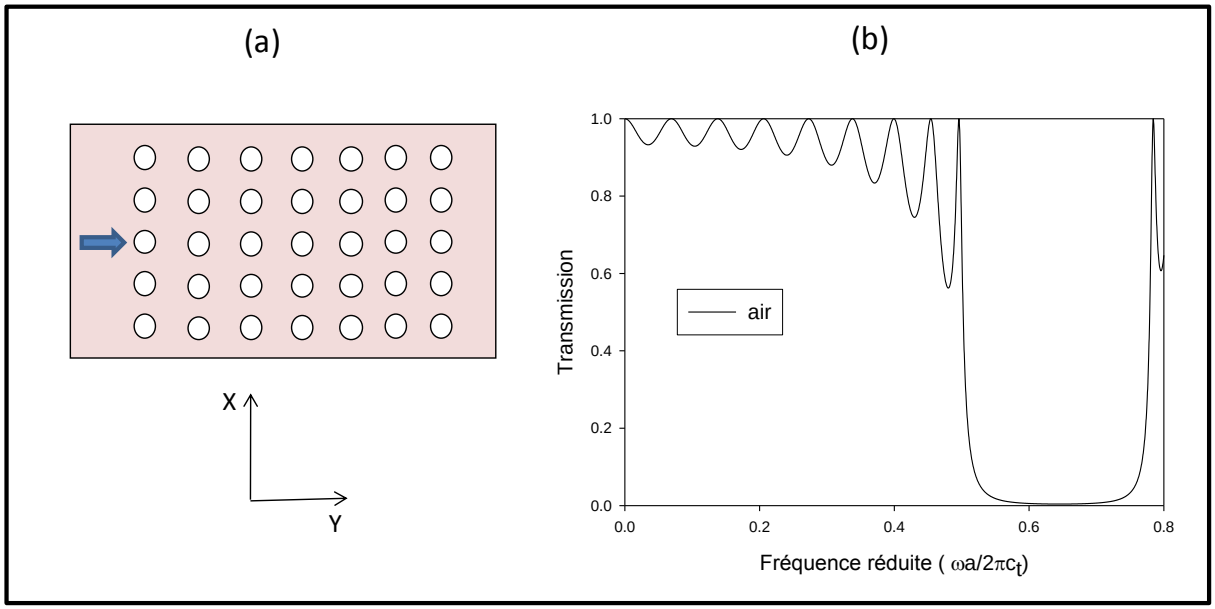


Figure 2 : (a) Représentation schématique du cristal phononique à 2D constitué de trous d'air en réseau carré dans une matrice de silicium. (b) Courbe de transmission lorsque le rayon des cylindres est $r_1 / a = 0.25$.

III-1-2 Transmission à travers le cristal avec une rangée de cylindres d'eau

Le fait d'introduire un défaut ou de rompre la périodicité d'une structure permet, sous certaines conditions, la propagation d'une onde de fréquence ω_0 à l'intérieur de la bande interdite phononique. Nous avons choisi d'insérer une ligne de défauts perpendiculairement à la direction de propagation (figure 3a). Ce défaut peut être géométrique en modifiant le rayon de la rangée de défaut par rapport au reste du cristal mais également physique en modifiant le matériau constitutif de la rangée, par exemple en remplaçant l'air par un liquide. Dans ce qui suit, nous avons joué à la fois sur ces deux paramètres de manière à positionner les fréquences des modes de défauts à l'intérieur de la bande interdite du cristal. Nous avons étudié le comportement du système lorsque la rangée centrale du cristal est remplie par de l'eau (figure 3a) avec les paramètres acoustiques vitesse et densité, respectivement, de 1490 m/s et 990 Kg/m^3, sans modifier le rayon des cylindres. La figure 3b montre le spectre de transmission dans lequel la courbe bleue représente la transmission à travers le cristal contenant la ligne de trous d'eau de rayon $r_2 / a = 0.25$. Nous avons également, pour comparaison, reporté en rouge la courbe de transmission précédente calculée à travers le cristal parfait. Dans le domaine spectral de 0 à 0.8, la courbe bleue présente deux chutes de transmission dans la bande

passante à 0.300 (A) et 0.482 (B), un pic 'C' très étroit dans la bande interdite à la fréquence 0.627 et enfin un autre de faible amplitude à (D). De manière à identifier les modes et connaître leur origine, la localisation de l'onde peut être visualisée de façon directe par une excitation incidente monochromatique à une fréquence de transmission choisie. Les cartes de champs de déplacement pour les trois premiers modes A, B et C sont illustrés sur la figure 3c décomposés selon leurs composantes longitudinale (y) et transverse (x). On peut voir clairement que ces modes sont parfaitement localisés à l'intérieur des cylindres d'eau ce qui indique un fort confinement du champ acoustique à l'intérieur des trous d'eau. Les pics et les creux A, B, et C correspondent à des modes propres du cylindre d'eau excités par l'onde plane incidente. Ces champs de déplacement sont représentés selon une échelle où le rouge et le bleu représentent, respectivement, les maximas et minimas des amplitudes de l'onde.

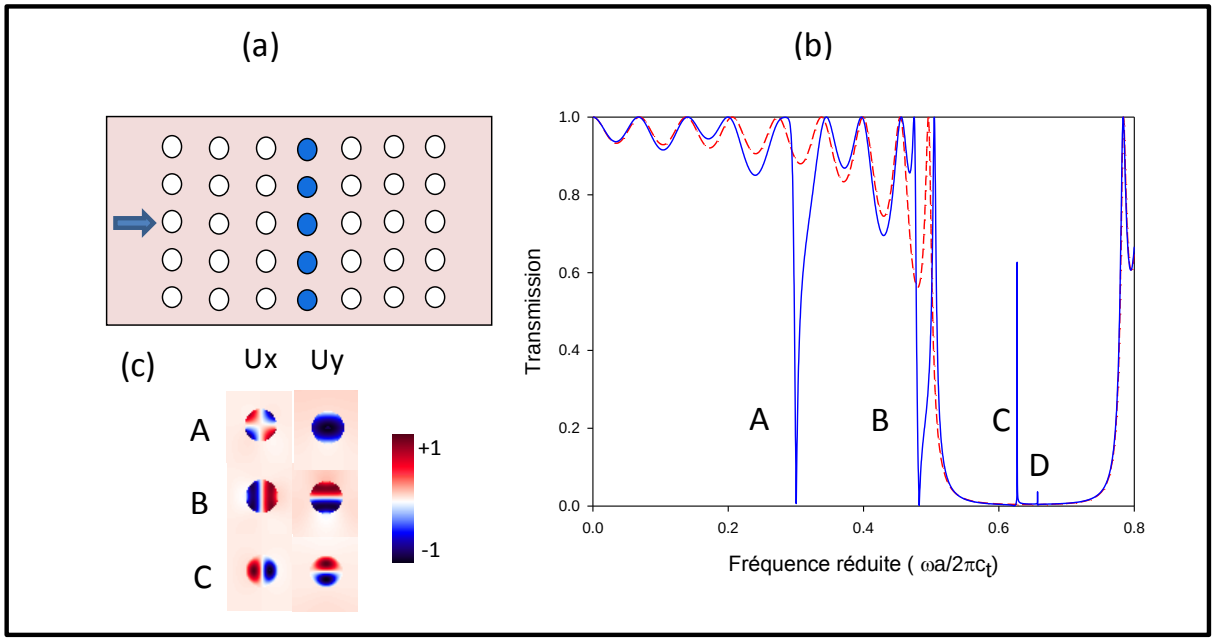


Figure 3 : (a) Représentation schématique d'une rangée de cylindres d'eau à l'intérieur de la matrice de silicium. (b) Courbe de transmission lorsque le rayon des cylindres est r_2 / a = 0.25. (c) Cartes des champs de déplacement des modes A, B et C.

III-1-3 Origine des modes et évolution des fréquences en fonction du rayon des cylindres d'eau

Les modes de défauts correspondants aux modes propres de la cavité, peuvent être excités directement, en s'affranchissant du cristal phononique. Le rayon normalisé des inclusions est

fixé, comme précédemment, à $r_1/a = 0.25$ (Figure 4a). Le calcul permet de relier les modes précédents aux modes propres d'un élément, à savoir la colonne d'eau. Nous montrons (figure 4b) la courbe de transmission à travers la rangée de cylindres remplie d'eau, insérée dans le substrat de silicium. Le spectre de transmission de la Figure 4b affiche une série de zéros de transmission, pour lesquels les cartes de champ de déplacement sont illustrées (figure 4c). Les zéros de transmission correspondent aux modes propres du cylindre d'eau dans le silicium, selon l'ordre fondamental et les ordres supérieurs de résonance. En raison d'un contraste important entre les vitesses acoustiques et les impédances (masse volumique et les constantes élastiques) de l'eau et Si, ces modes sont considérés comme des résonances de cavité à l'intérieur des trous entourés par un matériau rigide et, par conséquent, leurs fréquences sont très proches de la solution de la dérivée de l'équation $J'_m(\omega r/c_l) = 0$ où J_m est la fonction de Bessel d'ordre m, ω la fréquence, r le rayon du cylindre et c_l la vitesse du son dans l'eau. La figure 4d représente l'évolution des fréquences des modes en fonction du rayon des cylindres d'eau. Les résultats obtenus par le calcul numérique FDTD et reportés sous la forme de symboles sont en parfait accord avec les fréquences obtenues par l'équation analytique de la dérivée de fonction $J'_m(\omega r/c_l) = 0$, représentées par des lignes. Les modes A, B, C et D apparaissent à la même fréquence (moins de 1% de différence avec les modes propres) lorsque la ligne de cylindres d'eau est placée dans le cristal phononique (figure 3b) à la différence prêt que les modes propres des cylindres donnent lieu, dans la courbe de transmission de la figure 2b, à un pic ou à un zéro de transmission selon que les fréquences correspondantes tombent à l'intérieur de la bande passante (A, B) ou dans la bande interdite de la courbe de transmission du cristal parfait (C, D).

La figure 4d nous permet de voir que les fréquences des modes propres du cylindre peuvent être ajustées en faisant varier le rayon du cylindre d'eau. Lorsque le rayon r_2/a du cylindre augmente, les fréquences propres diminuent vers les basses fréquences puisque la taille de la cavité augmente. En parallèle, il est important de noter pour la suite que, lorsque r_2/a augmente, les fréquences deviennent plus proches les unes des autres. Par conséquent, pour garder les pics de résonance éloignés les uns des autres, il est judicieux de faire tendre les rayons au maximum vers les petites valeurs.

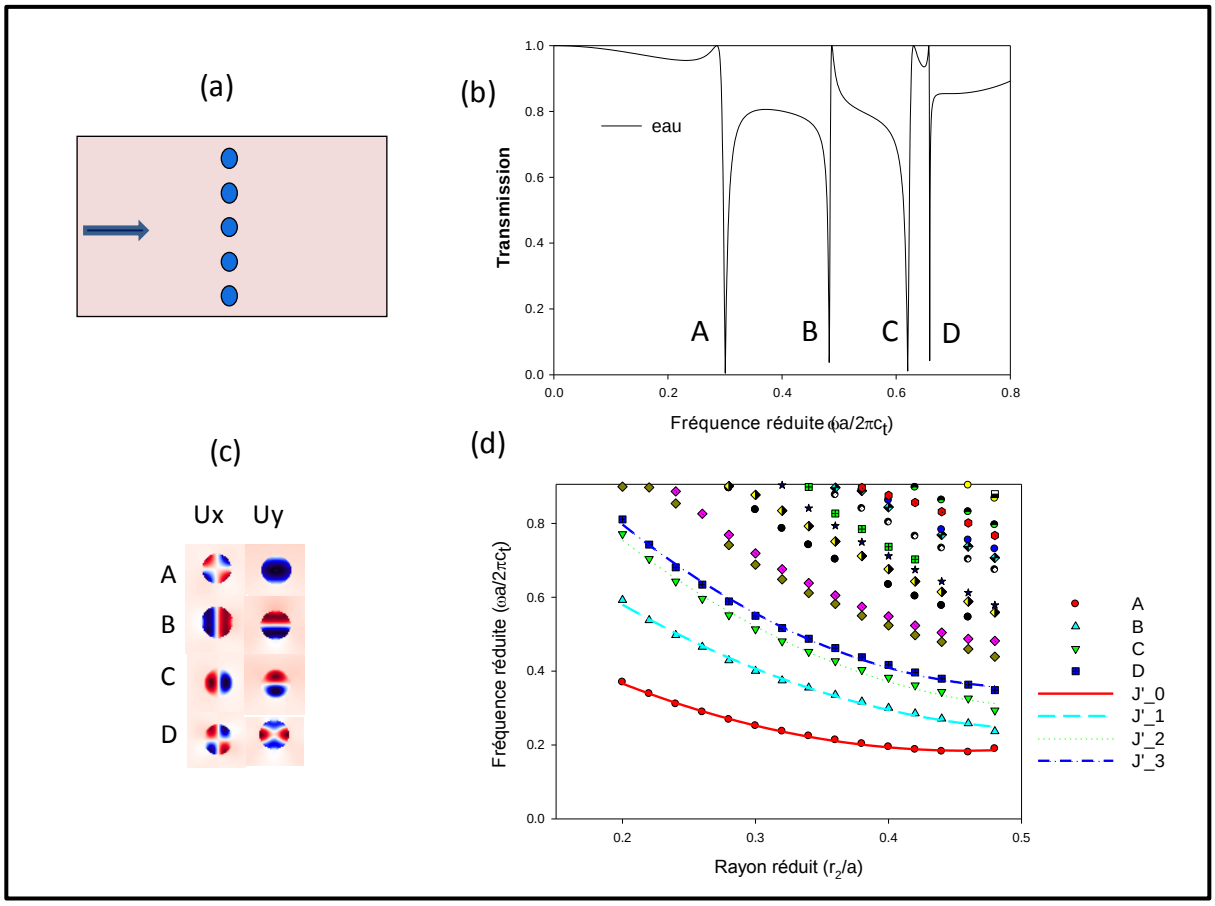


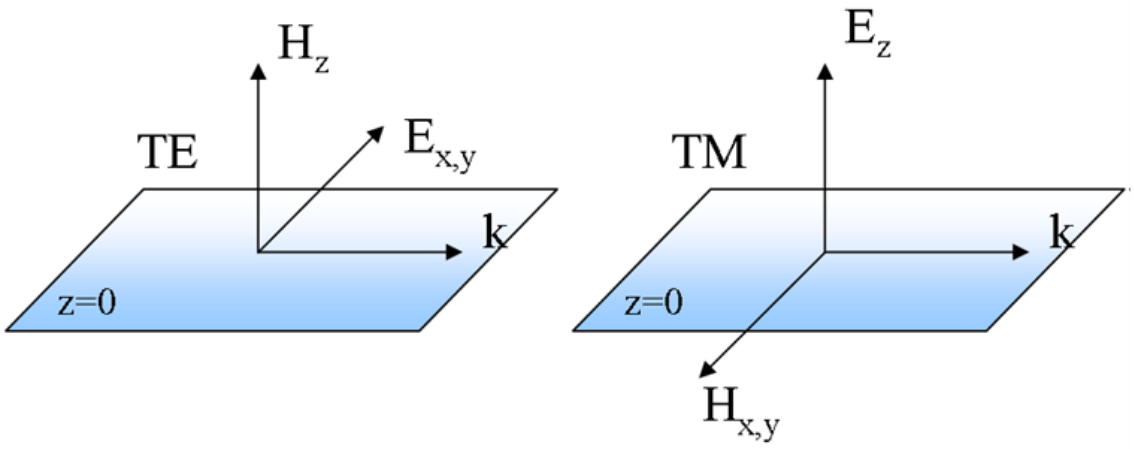
Figure 4 : (a) Représentation schématique d'une rangée de cylindres d'eau dans une matrice de silicium. (b) Courbe de transmission lorsque le rayon des cylindres $r_2/a = 0.25$. (c) Cartes des champs de déplacement aux zéros de transmission A, B, C et D. (d) Evolution des fréquences de résonances en fonction de (r_2/a). Calcul numérique par la FDTD (symboles) et analytique par la solution de la dérivée de l'équation J'm (ωr/cl) = 0 (lignes).

III-2 Etude photonique

III-2-1 Transmission à travers le cristal photonique parfait

En parallèle, nous avons étudié la transmission d'une onde électromagnétique à travers le même cristal périodique avec un premier calcul dans le cas du cristal photonique parfait constitué de cylindres d'air de rayon $r_1/a = 0.25$ dans le substrat de silicium. Les calculs numériques par la méthode FDTD présentent, en optique, une meilleure convergence spatiale. De ce fait, les pas de discrétisation dans l'espace suivant les deux directions x et y ont été pris égaux à $\Delta x = a/30 = \Delta y$. Comme précédemment, la propagation se fait dans la direction

perpendiculaire à l'axe des cylindres. L'onde incidente est décomposée en deux directions de polarisation indépendantes TE et TM comme indiqué sur le schéma ci-dessous. Pour la polarisation TE, les composantes électriques sont transverses, c'est-à-dire qu'elles sont dans le plan de périodicité du cristal photonique et transverses par rapport à l'axe des cylindres. Pour la polarisation TM ce sont les composantes magnétiques qui seront choisies transverses.



Définition des polarisations TE et TM.

Les courbes de transmission à travers le cristal parfait ont été calculées en fonction de la fréquence normalisée Ω et sont présentés dans la gamme [0, 0.5] sur les figures 5a et 5b, respectivement, pour les polarisations TE et TM. Du fait d'un fort contraste entre les impédances optiques des deux milieux en présence, à savoir le silicium et l'air, le cristal photonique présente, pour la direction de propagation choisie (y), plusieurs bandes interdites pour chaque polarisation dont les plus larges sont mis en évidence par des bandes de couleur. Nous obtenons [0.146-0.198], [0.389-0.429] et [0.466-0.490] pour le mode TE et [0.142-0.175], [0.397-0.433] et [0.455-0.480] pour le mode TM.

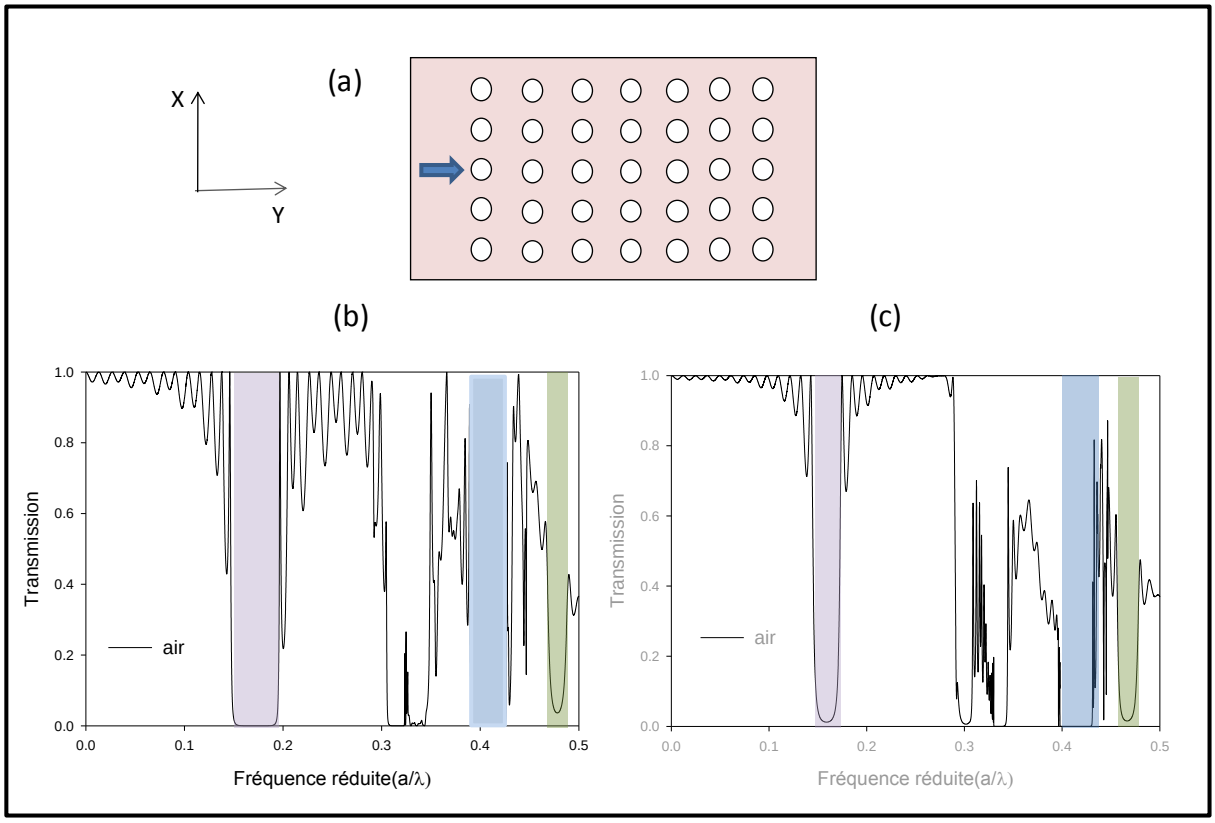


Figure 5 : (a) Représentation schématique du cristal photonique à 2D constitué de trous d'air en réseau carré dans une matrice de silicium. (b, c) Courbes de transmission lorsque le rayon des cylindres est r_1 / a = 0.25 pour les polarisations TE (b) et TM (c).

III-2-2 Transmission à travers le cristal avec une rangée de cylindres d'eau

De même qu'en phononique, de nouveaux états d'énergie photonique peuvent être créés en introduisant des défauts de structure dans le cristal photonique. Nous allons étudier le comportement optique du système précédent lorsque la rangée centrale de trous est remplie d'eau. La rangée de défauts cylindriques se définie alors par un changement de l'indice de réfraction, 1.333 dans le cas de l'eau, par rapport à celui de l'air. Avec la présence du liquide, la bande interdite, à basse fréquence n'a présenté aucune modification par rapport au cas du cristal parfait, quelle que soit la polarisation. Les figures 6b et 6c représentent les courbes de transmission agrandies autour de la seconde bande interdite ([0.389, 0.429] pour TE et [0.397, 0.433] pour TM), en bleue lorsque les trous sont remplis d'eau, en rouge pour le cas de l'air.

L'introduction de la rangée de cylindre d'eau conduit à l'observation de pics de transmission aux bords des bandes interdites, c'est-à-dire aux fréquences réduites 0.427 pour TE et 0.431 pour TM. Pour comprendre l'origine des modes, nous avons tracé les cartes de champs électriques et magnétiques dans le cristal pour une excitation monochromatique aux

fréquences correspondantes. Contrairement aux modes phononiques les figures 6d et 6e montrent que les champs électromagnétiques ne sont pas seulement confinés dans le cylindre d'eau mais se prolongent à proximité du défaut.

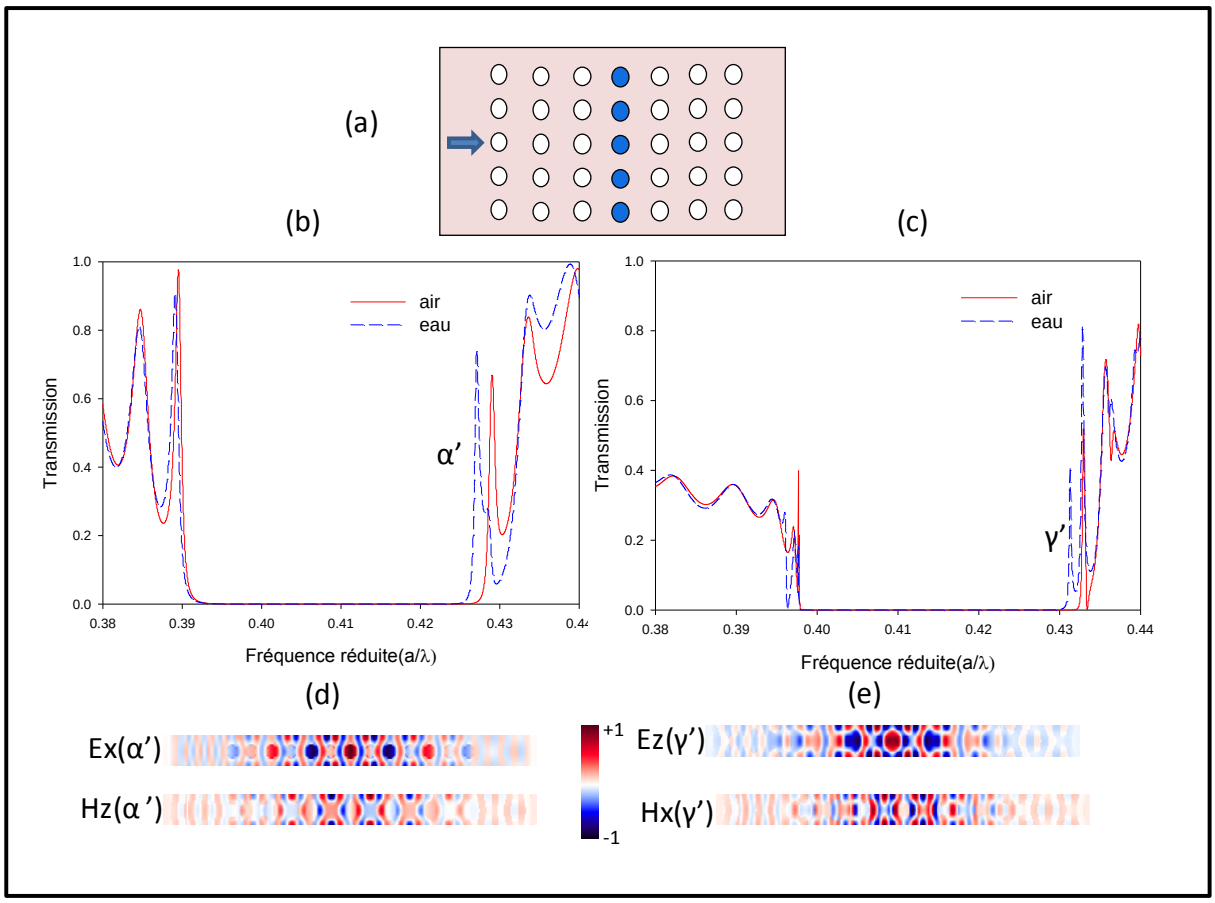


Figure 6 : (a) Représentation schématique d'une rangée de cylindres d'eau pour $r_2/a = 0.25$ à l'intérieur de la matrice de silicium. (b) et (c) Courbes de transmission pour les polarisations TE et TM, respectivement. (d) et (e) Cartes des champs électromagnétiques des modes α' et γ'.

III-2-3 Evolution des fréquences en fonction du rayon des cylindres d'eau

Dans le cas précédent, l'introduction du défaut linéaire a bien conduit à l'observation de pics de résonances dus à la présence du défaut. Cependant, ceux-ci apparaissent à la limite supérieure de la bande interdite. Pour déplacer et recentrer ces pics de résonance à l'intérieur des bandes interdites, nous avons fait varier le rayon des inclusions de la rangée centrale. Les figures 7b et 7c montrent les courbes de transmission obtenues pour un rayon $r_2/a = 0.36$, les régions bleues représentant les bandes interdites du cristal photonique parfait définies dans la gamme de fréquence [0.389, 0.429] (TE) et [0.397, 0.433] (TM). Pour cette valeur du rayon, on constate l'apparition de pics de transmission au milieu des gaps de photons. Ces modes de défaut correspondent à une forte localisation des champs électrique et magnétique dans

l'entourage de la cavité submicronique. Parmi les pics obtenus, on peut noter en TE le mode α à la fréquence 0.395 relativement bien isolé dans la bande interdite. En TM, le mode δ, situé à la fréquence 0.415, est également bien isolé dans la bande interdite avec un excellent facteur de qualité. La localisation de l'onde peut être visualisée de façon directe par une excitation incidente monochromatique à la fréquence de transmission choisie. Le calcul des cartes de champ électrique et magnétique (figure 7d et 7e) pour une onde incidente monochromatique à 0.395 (TE) et 0.415 (TM) correspondant aux fréquences des pics α et δ montre que l'énergie électromagnétique se localise dans le défaut et dans son proche environnement.

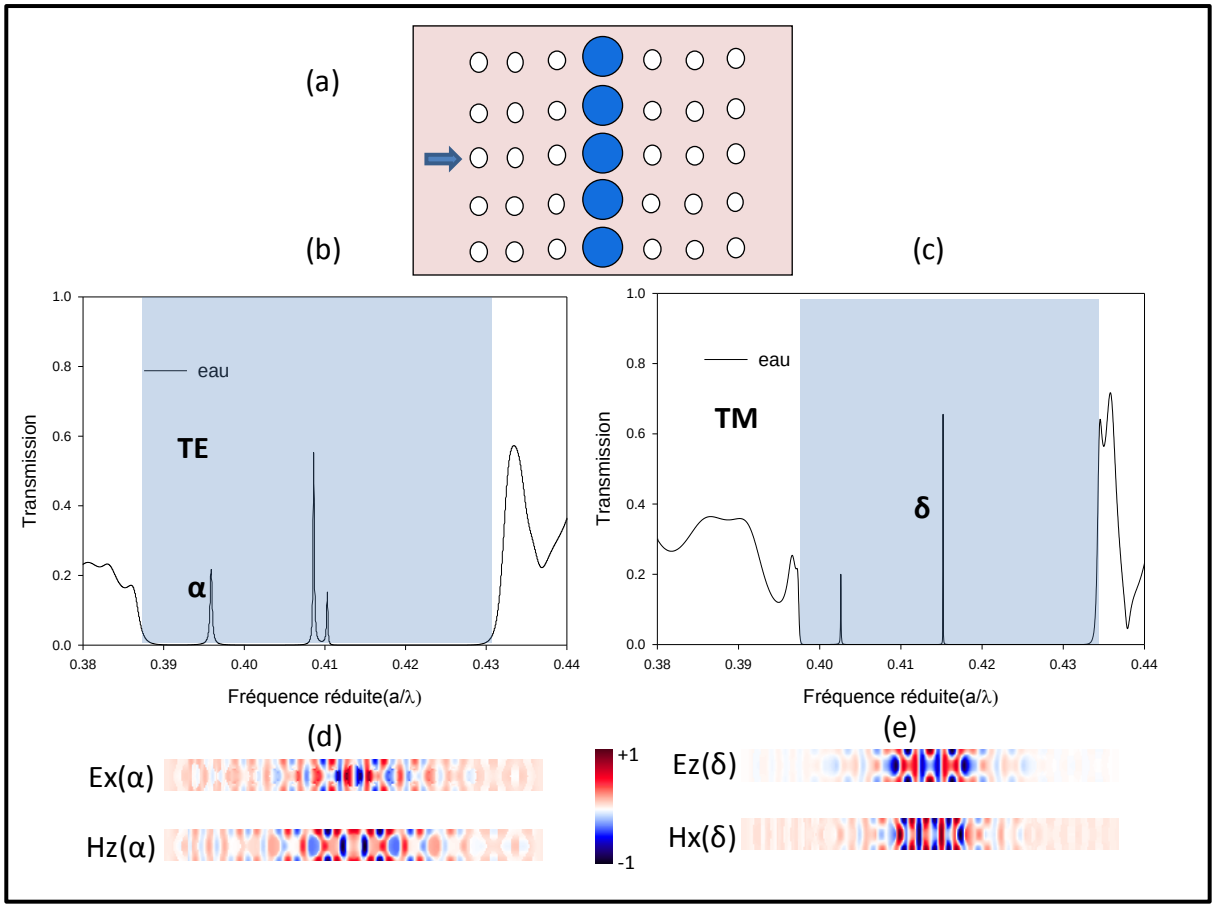


Figure 7 : (a) Représentation schématique d'une rangée de cylindres d'eau de rayon $r_2/a = 0.36$ à l'intérieur de la matrice de silicium. (b) et (c) Courbes de transmission TE et TM, respectivement. (d) et (e) Cartes des champs électromagnétiques aux fréquences des modes α et δ.

Comme mentionné plus haut de manière à améliorer les facteurs de qualité des pics de transmission, nous avons augmenté le nombre de cylindres avant et après le défaut de manière à accroître son confinement. Les résultats sont regroupés dans le tableau 2 pour un cristal photonique formé de sept, neuf, onze et treize périodes de longueur. Notons qu'il est bien

connu que l'adaptation d'impédance de part et d'autre de la cavité, par introduction d'un 'taper' permet encore d'améliorer de manière conséquente ces facteurs de qualité.

Tableau 2 : Facteur de qualité pour les modes α et δ en augmentant le nombre de cylindres.

Nombre de cylindres	Q_{TE} (α)	Q_{TM} (δ)
7	178	518
9	227	830
11	1021	9544
13	4000	25000

Ces résultats, obtenus pour deux valeurs de rayons, sont complétés de manière systématique en faisant varier le rayon des cylindres d'eau. La figure 8 rassemble l'évolution des fréquences des pics de résonance en fonction de r_2/a. Les lignes continues horizontales représentent les limites inférieures et supérieures des bandes interdites pour les modes TE et TM, respectivement. On remarque que les modes se déplacent vers les hautes fréquences avec le rayon, ce qui s'explique par la diminution progressive de l'indice de réfraction effectif [11-12] lorsque le rayon augmente. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de la littérature [13-14-15].

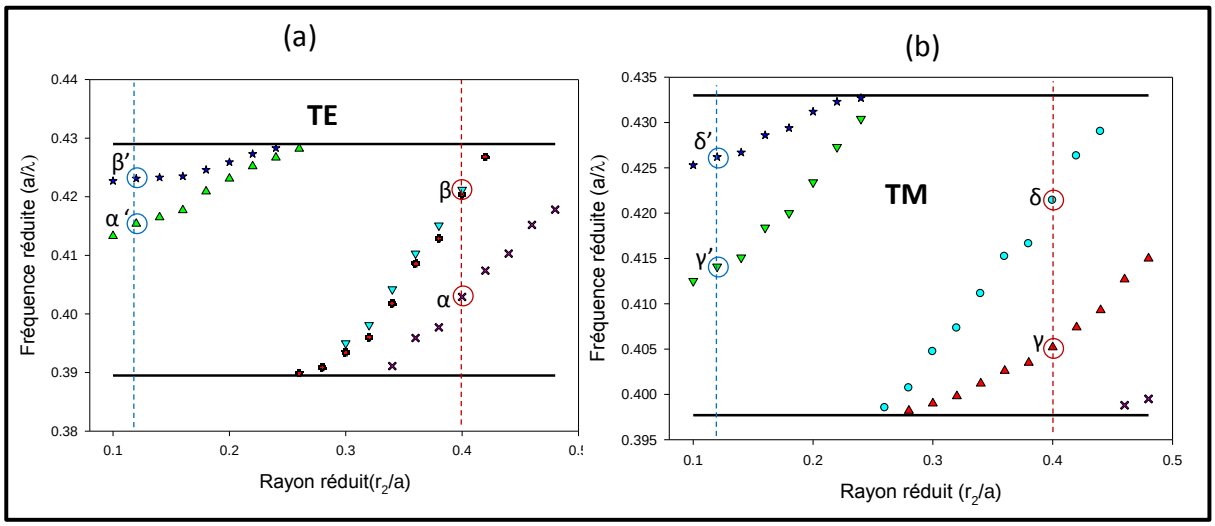


Figure 8 : Évolution des fréquences de résonance à l'intérieur de la bande interdite photonique en fonction du rayon r_2/a pour la polarisation TE (a) et TM (b).

IV- Définition d'un capteur photonique/phononique

Au cours des dernières décennies, les progrès considérables des techniques mises en jeu dans des domaines aussi variés que la médecine et la biologie clinique, l'agro-alimentaire ou le contrôle de la qualité de notre environnement (surveillance des rejets industriels ou domestiques) ont nécessité la mise au point de méthodes analytiques de plus en plus précises et sélectives. Les biocapteurs constituent sans doute l'alternative la plus séduisante pour proposer des systèmes simples, fiables, rapides et sélectifs de détection. Dans notre système les propriétés optiques et acoustiques changeant avec la présence d'eau dans les cylindres, nous pouvons nous interroger sur la manière dont le système réagit si on remplace l'eau par un autre liquide. Pour faire un tel capteur, doublement sensible aux ondes optiques et acoustiques, il faut concevoir une structure phononique/photonique pour laquelle les spécificités spectrales bien définies dans les courbes de transmission soient très sensibles aux vitesses acoustique/optique du liquide infiltré. Un état préliminaire est que ces pics et chutes sont relativement isolés dans les bandes interdites et/ou passantes du cristal, afin de permettre la détection du paramètre sondé sur une gamme de fréquences suffisamment large. En photonique, à partir des courbes 8(a et b), il est possible de définir les rayons des cylindres qui remplissent cette condition. Pour avoir des pics isolé au milieu des bandes interdites, le rayon devra être plus petit que $r_2 / a = 0.2$ ou plus grand que $r_2 / a = 0.35$. En phononique, comme nous l'avons déjà remarqué dans la première partie, les grands rayons de cylindres conduisent à une augmentation du nombre de modes de cavité qui se déplacent vers les basses fréquences. Pour autant, les premiers modes de résonances acoustiques A et B restent exploitables quelles que soient les valeurs des rayons des cylindres contenant le liquide. Dans ce qui suit, nous analyserons l'efficacité et la sensibilité du capteur aux ondes élastiques et optiques dans les deux situations extrêmes, à savoir un petit ($r_2 / a = 0.11$) et un grand ($r_2 / a = 0.4$) rayon des cylindres de liquide.

IV-1 Phononique

Les cristaux phononiques, sont présentés comme une nouvelle plateforme dans la détection des propriétés acoustiques des liquides. La faible taille des cavités nécessaire à la détection est un atout sachant que, dans de nombreuses situations, la quantité de liquide à tester est extrêmement restreinte. Ici, nous allons donc utiliser les pics de transmission spécifiques à l'intérieur de la bande interdite précédemment définis pour déterminer les propriétés du liquide. La dépendance de la fréquence dans le spectre de transmission est corrélée à ses

propriétés acoustiques, en particulier à la vitesse de propagation du son [5]. Cette valeur est liée à plusieurs paramètres d'intérêt pratique comme la concentration d'un composant dans un mélange ou le taux de conversion dans un microréacteur. Afin de tester l'efficacité de notre système nous avons rempli la rangée centrale du cristal phononique par du propanol dans l'eau à différentes concentrations dont les densités et les vitesses sont données dans le tableau 3 [5 ,16].

Tableau 3 : Vitesses acoustiques et masses volumiques du propanol à différentes concentrations.

X Propanol	Densité ρ (Kg/m^3)	Vitesse acoustique longitudinale (m/s)
0(eau)	998	1490
0.021	990	1545
0.056	974	1588
0.230	908	1421
0.347	881	1367
0.596	841	1298

La figure 9 montre les courbes de transmission obtenues sur la gamme de fréquences réduites [0, 0.8] en faisant varier la nature du liquide à l'intérieur de la rangée centrale. Les résultats sont présentés pour les rayons r_2/a = 0.11 (figure 9a) et r_2/a = 0.4 (figure 9b) en changeant l'eau par du propanol dilué à différentes concentrations. De manière générale, lorsque la vitesse acoustique du son diminue, les pics et zéros de transmission associés aux modes de résonances dans la cavité se déplacent vers les basses fréquences. Comme nous l'avions mentionné plus haut, en raison de l'augmentation de la taille des cavités, on constate sur la figure 9b que le nombre de creux et de pics dans le spectre de transmission augmente, augmentant ainsi le nombre de fréquences utiles pour la détection de la vitesse du son dans le liquide infiltré. Toutefois, au dessus d'une certaine fréquence réduite (0.4), les pics peuvent se mélanger du fait d'un trop faible écart fréquentiel entre eux. Dans le cas du grand rayon, il est préférable d'estimer la sensibilité du capteur à partir des seuls pics de résonance A et B. Leur comportement en fonction de la vitesse du liquide est reporté à une plus grande échelle de fréquence sur la courbe 9c. La représentation logarithmique (dB) de ces courbes de transmission permet de mettre en évidence leur extrême finesse. Une analyse quantitative des facteurs de qualité et des coefficients de sensibilité sera faite dans la dernière partie du chapitre.

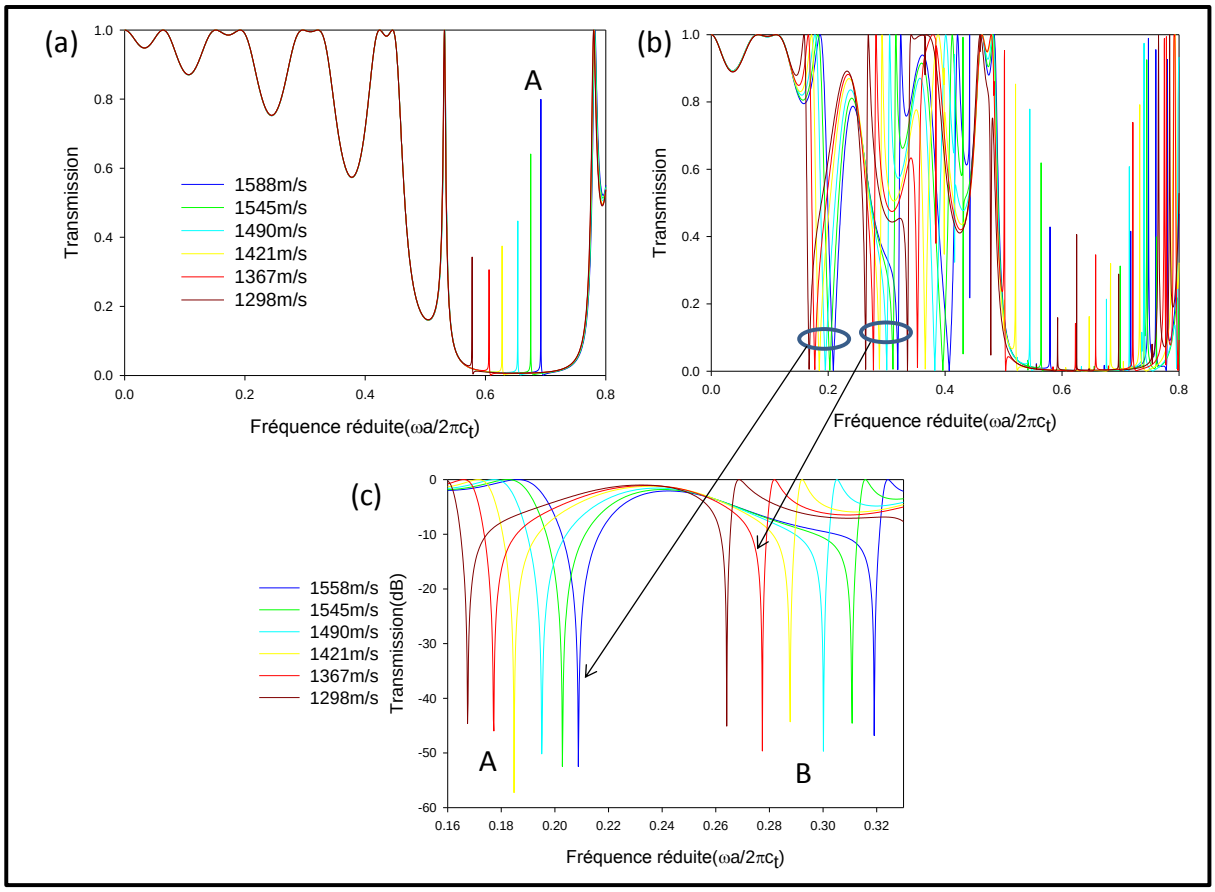


Figure 9 : (a) Évolution du spectre de transmission pour différentes concentrations de propanol remplissant les cylindres de la rangée centrale pour (a) $r_2/a = 0.11$ et (b) $r_2/a = 0.4$. (c) Agrandissement de la gamme de fréquence autour des deux modes A et B dans le cas $r_2/a = 0.4$.

IV-2 Photonique

L'application des cristaux photoniques dans le domaine des capteurs constitue un thème de recherche prometteur en raison de leur micro-structuration périodique permettant de piéger les photons et de créer des résonances optiques très sensibles à la présence des éléments à détecter. Récemment, plusieurs travaux de recherches utilisant les cristaux photoniques en tant qu'élément de détection ont été entrepris [17-19]. Ces dernières années les cristaux photoniques en silicium ont reçu une grande attention en raison de la forte possibilité qu'ils offrent dans les phénomènes de détection [20-22]. Les cavités nanométriques optiques formées par l'introduction de défauts dans un cristal photonique à 2D sont particulièrement intéressantes car elles prennent généralement en charge des modes de cavités très localisés. Le tableau 4 rassemble les indices optiques de matériaux différents, permettant de tester la sensibilité du capteur.

Tableau 4 : Indice de réfraction (RI) de différents fluides

Nature du liquide	Indice de réfraction
air	1.000
eau	1.333
1-butanol	1.397
1,3-propanediol	1.438
benzène	1.500
CS_2	1.630

Les figures 10 et 11 présentent l'évolution des courbes de transmission en fonction de la nature du fluide présent dans les cylindres de la rangée centrale. Comme précédemment en phononique, le calcul a été réalisé pour le petit ($r_2/a = 0.11$, figure 10) et le grand ($r_2/a = 0.40$, figure 11) rayon. Dans chaque figure, nous avons considéré les polarisations TE (haut) et TM (bas). Enfin, comme nous l'avons vu précédemment, plusieurs modes de cavité peuvent apparaître dans les bandes interdites (figure 8). La première remarque générale est que lorsque l'indice de réfraction augmente, les fréquences de résonances des modes se déplacent vers les basses fréquences. Ceci est en bonne correspondance avec l'augmentation de l'indice de réfraction effectif de la cavité. La seconde remarque porte sur les différences importantes entre les comportements des modes selon leur origine. Les modes ne présentent pas tous un facteur de qualité et une sensibilité équivalente. Pour $r_2/a = 0.11$ on remarque sur la figure10 que les modes α'(TE) et γ'(TM) sont plus sensibles au changement de liquide que les modes β' et δ'. C'est la même remarque si on compare leurs facteurs de qualité. Notons que d'une manière générale, les sensibilités en photonique sont meilleures pour les plus grands rayons.

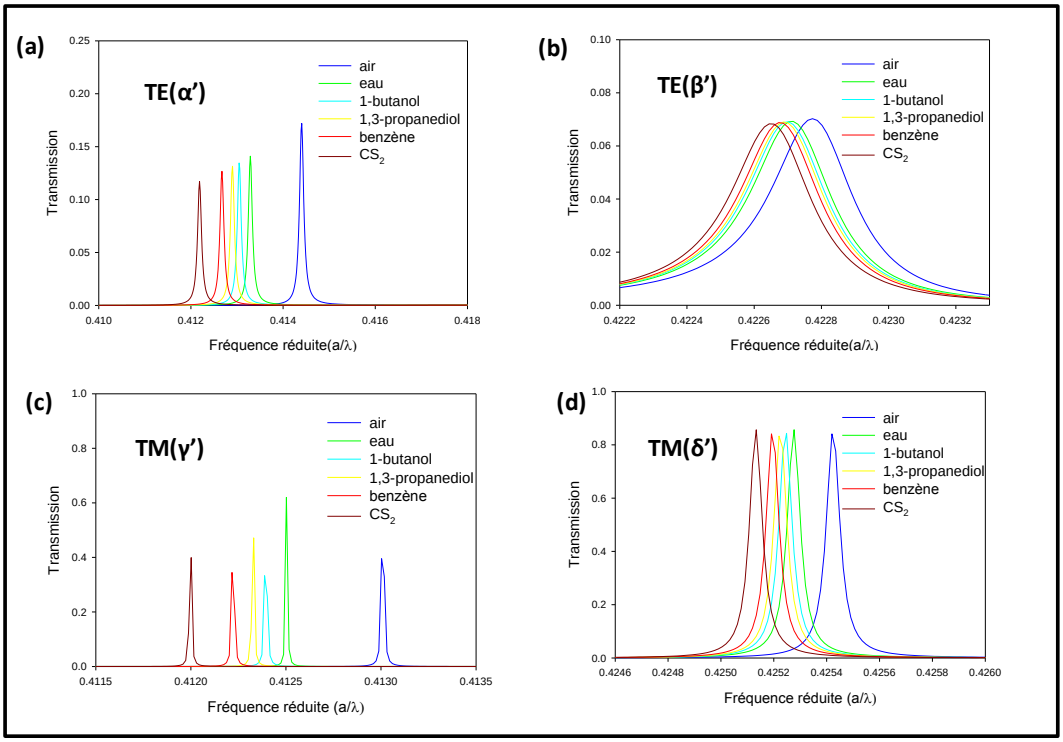


Figure 10: Évolution des spectres de transmission en fonction de l'indice de réfraction remplissant les cylindres de la rangée centrale de rayon $r_2/a = 0.11$, pour les polarisations TE (haut) et TM (bas) et pour les modes de résonances présents dans la bande interdite (voir figure 8).

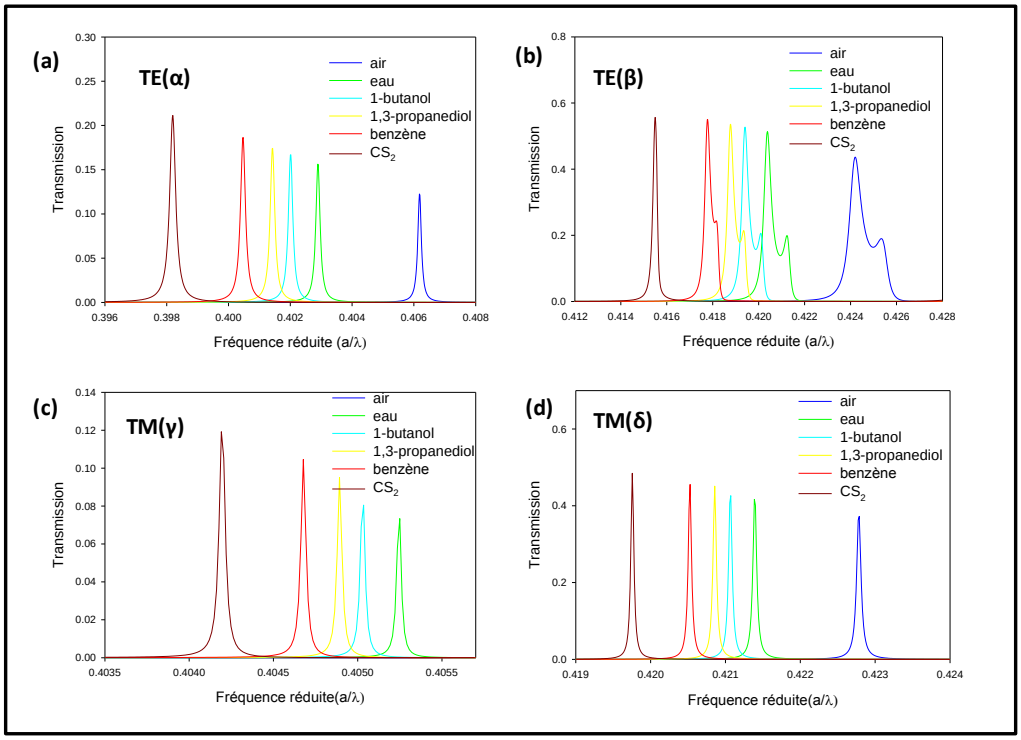


Figure 11: Évolution des spectres de transmission en fonction de l'indice de réfraction remplissant les cylindres de la rangée centrale de rayon $r_2/a = 0.4$ pour les polarisations TE (haut) et TM (bas) et pour les modes de résonances présents dans la bande interdite (voir figure 8).

Par souci de cohérence avec l'étude phononique pour laquelle le liquide inséré dans le défaut central était le propanol dilué à différentes concentrations, nous avons repris l'étude photonique en considérant les variations d'indices optiques reportées dans le tableau 5 [23]. Notons que ces données, issues de la littérature ne présentent pas les mêmes concentrations qu'en phononique.

Tableau 5 : Indices de réfraction du propanol dilué à différentes concentrations.

x Molaire de Propanol	Indice de réfraction
x = 0 (eau pure)	1.3330
x = 0.0322	1.3425
x = 0.0865	1.3540
x = 0.1443	1.3615
x = 0.3101	1.3735
x = 1 (1-Propanol)	1.3855

Les calculs ont été fait dans le cas de $r_2/a = 0.4$ qui, comme nous l'avons vu précédemment, présente la plus grande sensibilité. La figure 12 rassemble les courbes de transmission qui montrent qu'un changement faible de l'indice de réfraction de $\Delta n = 0.01$ permet une détection de la variation de la fréquence du pic de résonance et ceci malgré une faible quantité d'analyte. Notons parmi les conceptions précédentes de biocapteurs à base de cristaux photoniques qu'une détection avec un changement de RI de $\Delta n = 0.05$ a été obtenu par Loncard et al [1] en utilisant une nano-cavité GaAs laser. D'autres groupes [24-25] ont obtenus des résolutions de l'ordre de $\Delta n = 0.002$ à partir du couplage évanescent des ondes optiques à travers un guide d'onde présentant une nano-cavité.

Du point de vue quantitatif, les données seront exploitées à travers trois paramètres, le facteur de qualité (Q), la sensibilité (S) et la figure de Merit (FoM) qui seront introduits dans le paragraphe suivant.

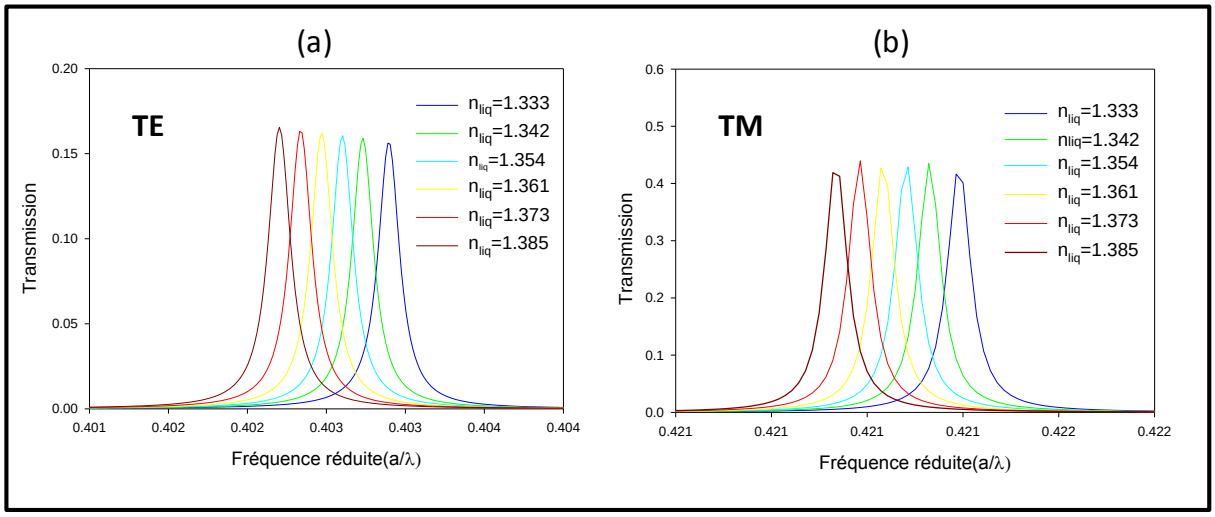


Figure 12 : Évolution du spectre de transmission pour différentes valeurs de l'indice de réfraction du propanol dilué à différentes concentrations dans le cas $r_2/a = 0.4$ et pour les modes (a) α (TE) et (b) γ (TM).

IV-3 Calcul des sensibilités (S) et des figures de Merit (FoM) du capteur photonique/phononique

Jusqu'à maintenant, les courbes de transmission ont été présentées en fonction de la fréquence réduite $\Omega = \omega a/(2\Pi c)$, donc sans dimensions réelles de la structure. Ainsi, par une simple loi d'échelle, les résultats obtenus peuvent s'appliquer à n'importe quelle fréquence en fonction du choix du paramètre de maille 'a' du réseau. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à une application spécifique en travaillant dans le domaine des télécommunications. Le paramètre de maille du cristal est alors défini de manière à obtenir une excitation des modes optiques résonants du liquide autour d'une longueur d'onde de 1.55 µm. Le fait de fixer la longueur d'onde optique de travail impose un paramètre de maille de a = 640 nm. Les fréquences des modes localisés en phononique tombent de fait dans la gamme de quelques GHz, autour de 6 GHz. A partir des courbes de transmission précédentes, nous avons reporté figures 13 (a) et (b) les variations des fréquences des modes A et B en fonction des vitesses acoustiques des liquides pour $r_2/a = 0.11$ et $r_2/a = 0.4$ respectivement. Les figures 13 (c) et (d) montrent l'évolution des longueurs d'onde optiques en fonction de l'indice de réfraction des modes α' (TE) et γ'(TM) pour $r_2/a = 0.11$ et α (TE) et δ (TM) pour $r_2/a = 0.4$.

Les courbes sont linéaires en phononique et quasi linéaires en photonique. Ainsi, le calcul de la courbe de transmission pour un liquide de concentration inconnue en propanol permet, à

partir de la valeur de la fréquence des modes de résonance de connaître les indices de réfraction optique et les vitesses acoustiques et donc à la nature du liquide.

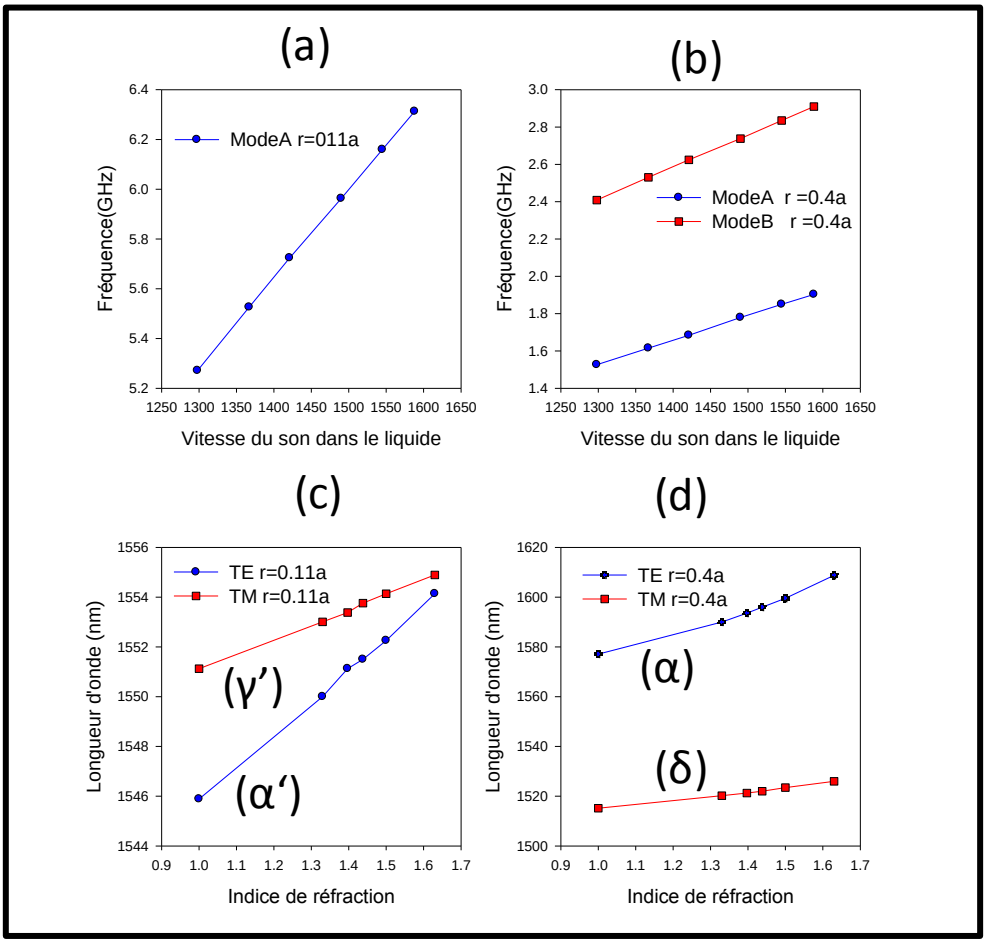


Figure 13: (a) et (b) Évolution des fréquences phononiques des modes A, B en fonction de la vitesse acoustique du liquide pour (a) $r_2/a = 0.11$ et (b) $r_2/a = 0.4$. (c) et (d) Evolution des longueurs d'ondes des modes α', α (TE) et γ', δ (TM) en fonction de l'indice de réfraction du liquide pour (c) $r_2/a = 0.11$ et (d) $r_2/a = 0.4$.

L'efficacité du capteur peut être évaluée quantitativement par le calcul de la sensibilité qui correspond aux pentes des courbes de la figure 13. Les sensibilités sont donc données par les expressions :

$$S^{j}_{photonic} = \frac{\Delta\lambda_j}{\Delta n_{liq}} \text{ (nm/RIU)}$$

en photonique, où RIU signifie 'Refractive Index Unit', et en phononique

$$S^{i}_{phononic} = \frac{\Delta f_i}{\Delta c_{liq}} \text{ (MHz/ms}^{-1}\text{)}$$

Nous avons calculé les sensibilités pour chacun des modes de résonance optiques et acoustiques. Ces résultats sont rassemblés dans le tableau 6. En phononique le mode A, donne une sensibilité deux fois plus grande dans le cas r_2 = 0.11a que pour r_2 = 0.4a. Ceci peut se comprendre par un meilleur confinement de l'onde dans le premier cas du fait d'une localisation du mode à l'intérieur de la bande interdite, et non dans la bande passante. Il en résulte dans notre exemple que le meilleur capteur en phononique est obtenu pour des petites valeurs du rayon du défaut. La valeur de la sensibilité phononique est en bon accord avec celles de la littérature [26]. En photonique, par contre, on remarque que la sensibilité est meilleure pour les grands rayons (r_2 = 0.4a). Cela est dû à la taille de la cavité et à la quantité plus importante de liquide. Pour le mode TE la sensibilité obtenue est comparable à celle déterminée par Dorfner et al. [27] en utilisant une cavité L3.

Tableau 6 : Sensibilité phononique et photonique S.

r_2/a	$S^{A}_{phononique}$ MHz/ms^{-1}	$S^{B}_{phononique}$ MHz/ms^{-1}	$S^{TE}_{photonique}$ nm/RIU	$S^{TM}_{photonique}$ nm/RIU
0.11	3.6	/	14(α')	6(γ')
0.4	1.32	1.73	58(α)	18(δ)

Une autre façon d'estimer l'efficacité d'un capteur a été utilisée en photonique par le biais du calcul de la figure de Merit (FoM) défini par :

$$FoM^{j}_{photonic} = \frac{S_j \times Q_j}{\lambda_j} \quad (\mathrm{RIU}^{-1})$$

où Q_j est le facteur de qualité photonique du mode *j*.

En parallèle, nous pouvons définir une grandeur équivalente en phononique à partir de l'expression suivante :

$$FoM^{i}_{phononic} = \frac{S_i \times Q_i}{f_i} \quad (\mathrm{m/s})^{-1}$$

où Q_i est le facteur de qualité phononique du mode *i*.

Le tableau 7 rassemble les données numériques des facteurs de qualité et des figures de Merit pour l'ensemble des modes optiques et acoustiques. De nouveau, dans notre exemple, la figure de Merit la plus importante a été obtenue dans le cas du petit cylindre en phononique alors qu'en photonique, c'est dans le cas du plus grand rayon. Enfin, on peut remarquer que la figure

de Merit rend compte du fait qu'une faible sensibilité est compensée par un grand facteur de qualité.

Tableau 7 : Facteur de qualité (Q) et figure de Merit (FoM) phononique et photonique.

r_2/a (a = 640nm)	Q_A	$FoM^A_{phononic}$ $(m/s)^{-1}$	Q_B	$FoM^B_{phononic}$ $(m/s)^{-1}$	Q^{TE}	$FoM^{TE}_{photonic}$ (RIU^{-1})	Q^{TM}	$FoM^{TM}_{photonic}$ (RIU^{-1})
0.40	185	0.14	430	0.27	4000 (α)	150 (α)	15000 (δ)	175 (δ)
0.11	3750	2.25	/	/	4100 (α')	40 (α')	25000 (γ')	110 (γ')

Nous avons montré que la transmission de l'onde acoustique et optique à travers un cristal phoxonique ayant une cavité remplie de liquide à l'intérieur peut être avantageusement utilisée à des fins d'identification de liquide. Nous avons démontré théoriquement les capacités de détection en utilisant les pics et les zéros de transmission de résonance de modes localisés. Nous avons démontré la sensibilité des positions des pics de résonance aux vitesses du son et de la lumière du liquide remplissant la cavité. Etant donné que la vitesse du son et l'indice de réfraction dépendent de la fraction molaire du mélange liquide, il est possible de déterminer la concentration d'un constituant dans un mélange liquide inconnu. L'analyse des spectres de transmission du liquide en photonique et en phononique permet ainsi de caractériser la vitesse longitudinale et l'indice de réfraction du liquide offrant ainsi une double opportunité d'analyse du liquide. Par ailleurs, en agissant sur les propriétés optiques et acoustiques du liquide, il est possible d'accorder les fréquences (ou des longueurs d'ondes) en sortie du capteur, à la fois en photonique et en phononique dans le domaine recherché. Nous pouvons ainsi imaginer un dispositif fluidique dynamique dans lequel la modification du liquide dans les trous permet le filtrage et l'accordabilité de fréquences spécifiques.

V-Transmission à travers un défaut large

Dans cette partie, nous cherchons à connaître l'effet d'un défaut plus large, constitué de plusieurs rangées de liquide et de comprendre son impact sur la sensibilité du capteur. Le cristal étudié comporte deux, puis trois rangées de cylindres remplis d'eau et nous comparerons ces nouveaux résultats avec ceux établis dans la première partie. Le rayon des lignes de défauts a été choisi égal à $r_2/a = 0.4$. Du point de vue numérique, l'élargissement de la taille de la structure comprenant les défauts ne pose pas de problème particulier. L'ajout de

cylindres d'eau se traduit simplement par une augmentation de la taille du système linéaire (figure 14a), entrainant une augmentation du temps de calcul.

Les figures 14b et 14c, représentent les spectres de transmission pour une, deux et trois rangées d'eau, respectivement, pour le cristal phononique et photonique en polarisation TM. On constate deux effets physiques très différents selon le modèle acoustique ou optique. Pour la transmission phononique, on remarque que les modes A, B, C obtenus dans le cas d'une seule rangée d'eau s'élargissent en conservant la valeur de leur fréquence centrale quand on augmente le nombre de rangées et deviennent des mini bandes interdites. En photonique, les modes de défauts obtenus précédemment avec un cylindre diminuent en fréquence (modes δ et γ). Dans le même temps, de nouveaux modes de résonance apparaissent à partir de la limite supérieure de la bande interdite, dans le cas de trois cylindres d'eau, on note par exemple, la présence du pic de résonance Γ qui présente un bon facteur de qualité.

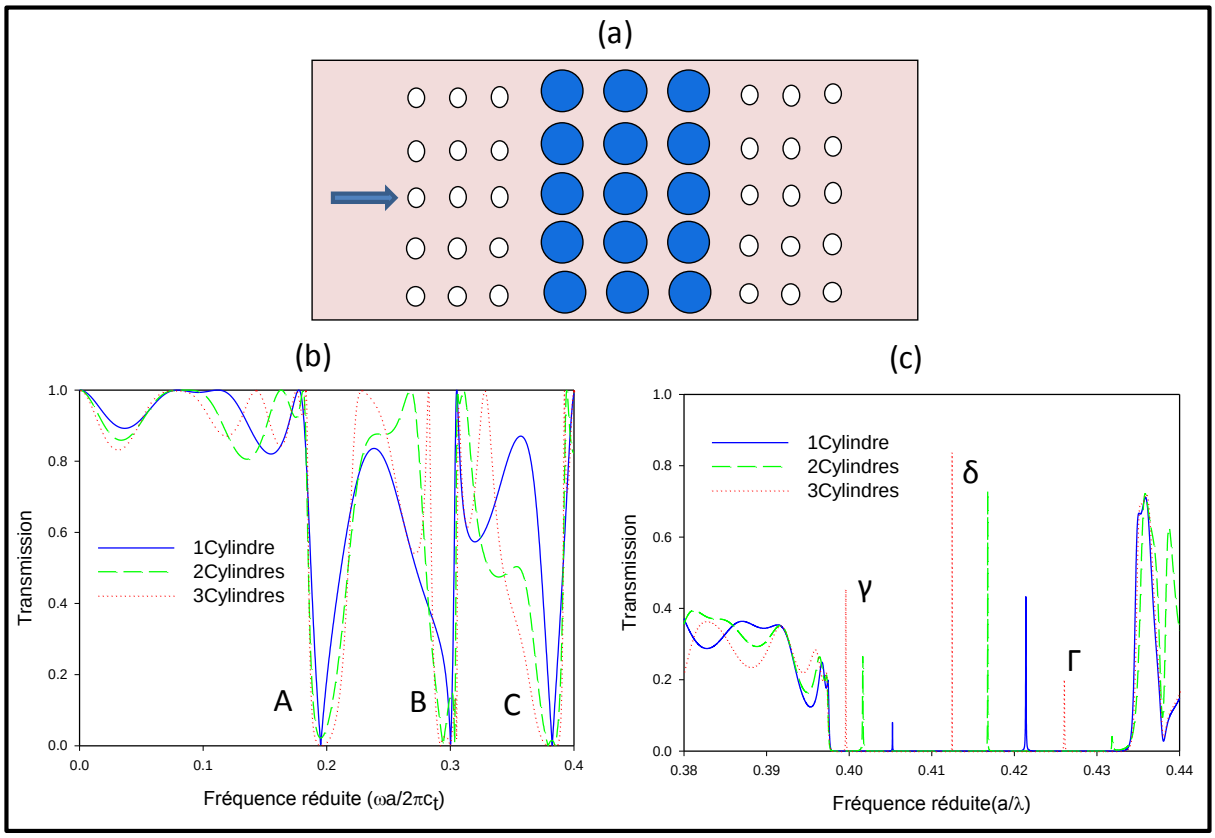


Figure 14 : (a) Représentation schématique de trois rangées de cylindres d'eau pour $r_2/a = 0.4$ à l'intérieur du cristal en silicium. (b) et (c) Courbes de transmission phononique et photonique (TM) lorsque une rangée, deux puis trois rangées de cylindres sont remplies d'eau.

Nous avons testé l'efficacité du capteur dans le cas de trois rangées de cylindres d'eau en modifiant les vitesses longitudinales du liquide en phononique et les indices de réfraction en photonique (figure 15). En phononique, nous nous sommes intéressés aux modes A et B. Dans ce cas, l'évaluation de la sensibilité a été faite en considérant la translation en fréquence de la limite inférieure des mini gaps plutôt que de prendre la variation de la fréquence centrale du mode. Dans ce cas, nous avons obtenu une sensibilité identique au cas d'un cylindre d'eau. En photonique, nous avons augmenté la sensibilité qui est passée pour le mode δ de 18 nm/RIU à 38 nm/RIU.

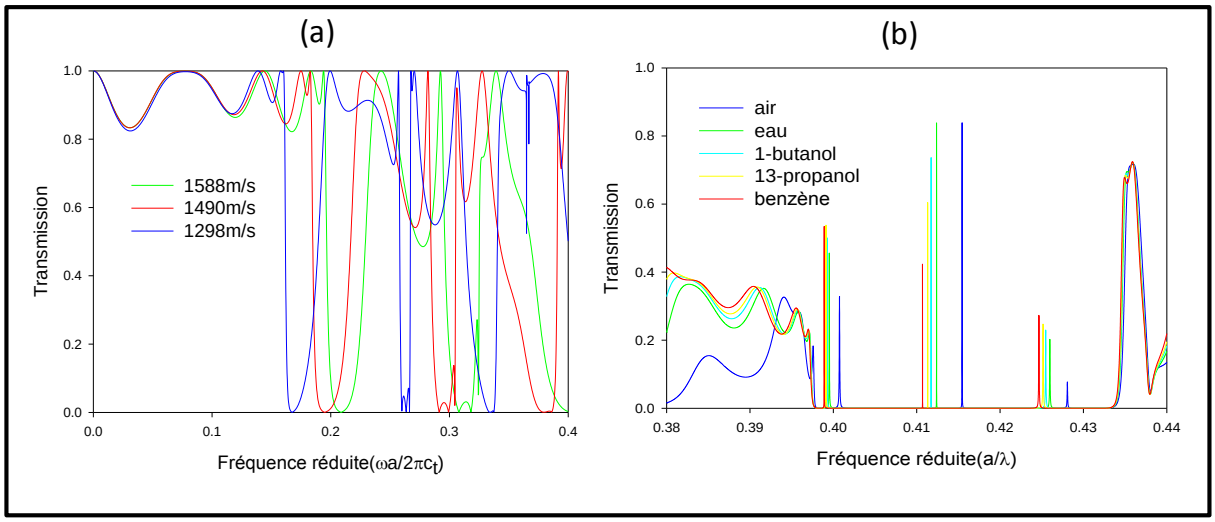


Figure 15: Évolution des spectres de transmission phononique (a) et photonique TM (b) pour différentes valeurs des indices de réfraction acoustique et optique dans le cas de trois rangées de liquide ($r_2/a = 0.4$).

VI- Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié un cristal phononique/photonique à 2D formé de trous d'air cylindriques infinis dans un substrat de silicium. Dans ce cristal, une rangée de trous perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde incidente a été remplie d'eau. Nous avons montré que cette structure présentait des pics et des zéros dans les spectres de transmission phononique et photonique. Leur origine physique a été identifiée à des modes de résonance. En phononique, les modes correspondants sont fortement confinés dans les trous d'eau et les solutions sont des dérivés des fonctions de Bessel d'un cylindre infini d'eau. En photonique, les modes ne sont pas seulement confinés dans le trou rempli d'eau mais s'étendent également à proximité du défaut. La taille du trou de l'eau a été optimisée de manière à ce que les fréquences des modes soient bien définis et suffisamment isolés les uns

des autres. Ces modes peuvent apparaître dans des bandes passantes ou interdites. Nous avons démontré que ce cristal pouvait être utilisé comme capteur, sensible à la fois aux propriétés acoustique et optique, à travers la détection simultanée des vitesses du son et de la lumière des liquides infiltrés. Nous avons démontré que si nous nous référons aux vitesses du son et de la lumière, les modes acoustiques et optiques se décalent de la même manière : une augmentation de la vitesse du son (lumière) mène à un décalage de la fréquence vers le bleu en (photonique) phononique. Enfin, l'efficacité du capteur phononique/photonique a été examiné en définissant et en comparant les paramètres de sensibilité (S), de facteur de qualité (Q) et de figure de Merit (FoM) pour deux tailles de la cavité remplie d'eau. Nous avons trouvé que, même si les deux rayons peuvent être choisis pour sonder l'analyte, une sensibilité plus élevée a été obtenue pour le rayon plus petit en phononique tandis que le rayon le plus grand offre la plus grande sensibilité en photonique. Nous avons dans ce chapitre proposé une nouvelle classe de capteur doublement sensible aux ondes acoustique et optique pouvant sonder les vitesses de la lumière et du son d'un liquide inconnu dans une même structure.

Bibliographie

[1] M. Lončar, A. Scherer and Y. Qiu, *Photonic crystal laser sources for chemical detection*, Appl. Phys. Lett. 82, 4648 (2003).

[2] X. Wang, Z. Xu, N. Lu, J. Zhu and G. Jin, *Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure*, Optics Communications 281**,** 1725 (2008).

[3] U. Bog, C. L. C. Smith, M. W. Lee, S. Tomljenovic-Hanic, C. Grillet and C. Monat, *High-Q microfluidic cavities in silicon-based two-dimensional photonic crystal structures*, Opt. lett. 33, 19 (2008).

[4] Y. Liu and H. W. M. Salemink, *Photonic crystal-based all-optical on-chip sensor*, Opt. Express 20, 19912 (2012).

[5] R. Lucklum and J. Li, Meas, *Phononic crystals for liquid sensor applications, Sci. Technol*. 20, 124014 (2009).

[6] R. Lucklum, M. Ke and M. Zubtsov, *Two-dimensional phononic crystal sensor based on a cavity mode*, Sensors Actuators B 271, 171 (2012).

[7] Charles Kittel, *Physique de l'état solide*, 7e édition, Dunod (1998).

[8] M. M. Sigalas, E. N. Economou, *Elastic and acoustic wave band structure, J. Sound Vibr*. 158, 377 (1992).

[9] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani and V. Laude, *Experimental study of guiding and filtering of acoustic waves in a two dimensional ultrasonic crystal*, Z. Kristallogr. 219, 836 (2004).

[10] M. Qiu and B. Jaskorzynska, *Design of a channel drop filter in a two- dimensional triangular photonic crystal*, Appl. Phys. Lett. 83, 1074 (2003).

[11] X. Ye, Y. Li, J. Dong, J. Xiao, Y. Ma and L. Qi, *Facile synthesis of ZnS nanobowl arrays and their applications as 2D photonic crystal sensors*, J. Mater. Chem. C 10, 1039 (2013).

[12] C. Li, G. Hong and L. Qi, *Nanosphere Lithography at the Gas/Liquid Interface: A General Approach toward Free-Standing High-Quality Nanonets*, Chem. Mater. 22, 476 (2010).

[13] X.Wang, Z. Xu, N. Lu, J. Zhu and G. Jin, *Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure*, Opt. Commun 281, 1725 (2008).

[14] A. Benmerkhi, M. Bouchemat,T. Bouchemat and N. Paraire, *Numerical optimization of high-Q-factor photonic crystal microcavities with a graded air lattice*, J. Opt. Soc. Am. B 28, 2 (2011).

[15] A. Benmerkhi, M. Bouchemat and T. Bouchemat, *Ultrahigh-Q of the L3 photonic crystal microcavity*, Optik 124, 5719 (2013).

[16] C. J. Burton, J. Acous. Soc. Am. 20**,** 2 (1947).

[17] C. L. C. Smith, U. Bog, S. Tomljenovic-Hanic, M. W. Lee, D. K. C. Wu, L. O'Faolain, C. Monat, C. Grillet, Thomas. F. Krauss, C. Karnutsch, R. C. McPhedran and B. J. Eggleton, *Reconfigurable microfluidic photonic crystal slab cavities*, Opt. Express 16, 20 (2008).

[18] J. G. Castelló, V. Toccafondo, P. Pérez-Millán, N. S. Losilla, J. L. Cruz, M. V. Andrés, and J. García-Rupérez, *Real-time and low-cost sensing technique based on photonic bandgap structures*, Opt. Lett. 36, 14 (2011).

[19] J. O. Grepstad, P. Kaspar, O. Solgaard, I.R. Johansen and A. S. Sudbo, *Photonic-crystal membranes for optical detection of single nano-particles, designed for biosensor application*, Opt. Express 20, 7 (2012).

[20] D. Dorfner, T. Hürlimann, G. Abstreiter and J. Finley, *Optical characterization of silicon on insulator photonic crystal nanocavities infiltrated with colloidal PbS quantum dots*, Appl. Phys. Lett. 91, 233111 (2007).

[21] I. White and X. Fan, *On the performance quantification of resonant refractive index sensors*, Opt. Express 16, 1020 (2008).

[22] N. Mortensen, S. Xiao and J. Pedersen, *Liquid-infiltrated photonic crystals : enhanced light-matter interactions for lab-on-a-chip applications*, Microfluid Nanofluid 4, 117 (2008).

[23] F. Koohyar, F. Kiani, S. Sharifi, M. Sharifirad and S. H. Rahmanpour, Research Journal of Applied Sciences, Engineering and Technology 4(17), 3095 (2012).

[24] E. Chow, A. Grot, L.W. Mirkarimi, M. Sigalas and G. Girolami. *Ultracompact biochemical sensor built with two-dimensional photonic crystal microcavity*, Opt. Lett. 29, 1093 (2004).

[25] M. Lee and P. Fauchet, *Two-dimensional silicon photonic crystal based biosensing platform for protein detection*, Opt. Express 15, 4530 (2007).

[26] R. Lucklum. *Phononic crystal sensor* IEEE Int. Freq. Control Symp. Proc. pp 85–90 (2008).

[27] D. F. Dorfner, T. Hürlimann, T. Zabel, L. H. Frandsen, G. Abstreiter, *Silicon photonic crystal nanostructures for refractive index sensing*, Appl. Phys. Lett. 93, 181103 (2008).

Chapitre 4

Etude de la transmission normale à une membrane phononique/photonique : application à la détection des liquides biochimiques

I- Introduction :

Les structures photoniques sous la forme de plaques représentent une classe très prometteuse de matériaux hétérogènes vis-à-vis de leurs intégrations dans les circuits optiques compte tenu de leur faisabilité par les techniques usuelles de fabrication [1,2]. Les plaques à cristal photonique à deux dimensions (2D) ont montré leurs aptitudes dans la mise en évidence de microcavités optiques à haut facteur de qualité Q [3-5]. Ce point les rend tout particulièrement attrayant pour la réalisation de capteurs à haute sensibilité [6-7]. Au cours de ces dernières années, les cristaux photoniques sous forme de plaque finie ont fait l'objet de plusieurs études en vue d'explorer les transmissions dans le plan et hors plan de la plaque. Dans le cas de la transmission perpendiculaire à la membrane photonique il a été montré qu'il était possible de transmettre à travers des ouvertures largement plus petite que la longueur d'onde incidente. Les conditions nécessaires à une telle transmission font intervenir des propriétés optiques exceptionnelles utilisant l'excitation cohérente du métal à travers le plasmon de surface du métal. Cette transmission, connue sous le nom de 'EOT' pour Extraordinary Optical Transmission, a été démontrée par Ebbesen et al. [8]. Par la suite, cette propriété plasmonique a été utilisée pour la détection de liquide avec de bonnes sensibilités aux variations d'indices de réfraction [9-10]. Les plaques à cristaux photoniques ont ainsi motivé notre intérêt dans la recherche de phénomènes analogues dans les plaques à cristaux phononiques. L'étude des plaques à cristaux phononiques est devenue un sujet d'intérêt depuis quelques années seulement par des études de transmissions dans le plan ou hors du plan de la plaque. En effet, B. Djafari Rouhani et d'autres auteurs [11-13] ont démontré qu'avec un choix approprié des paramètres géométriques et physiques, ces structures d'épaisseur finie pouvaient présenter des bandes interdites absolues. Cette propriété fondamentale permet le contrôle et la manipulation des ondes élastiques en présentant de nombreuses applications comme par exemple la réalisation de cavités résonantes à haut facteur de qualité [14, 15].

Le but de ce chapitre est de montrer que l'on peut étendre le concept académique développé dans le cadre d'une structure à 2D que nous avons étudié dans le chapitre précédent à une structure réelle et intégrable à 2D membranaire. Ces structures offrent la possibilité d'un contrôle de la propagation des ondes à la fois dans le plan du cristal mais aussi dans la direction perpendiculaire. Dans ce chapitre, nous nous intéresserons à un cristal d'épaisseur finie, à la fois photonique et phononique, constitué d'une plaque en silicium percée de trous

plongée dans l'eau. Dans cette géométrie, nous allons considérer la direction de propagation des ondes incidentes perpendiculaire au cristal phononique/photonique. Nous montrerons l'existence de caractéristiques bien définies comme des pics et des zéros dans les spectres de transmission des ondes acoustiques et optiques et nous évaluerons leur sensibilité aux vitesses acoustique et optique du milieu liquide.

Ce chapitre est structuré avec une première partie dédiée à la description de la structure, en définissant les paramètres géométriques et physiques. La deuxième partie porte sur l'étude des transmissions phononique et photonique perpendiculairement au plan du cristal phoxonique et de leurs variations fréquentielles en fonction des paramètres géométriques. Enfin, dans la dernière partie, nous discuterons du choix des paramètres géométriques sur les coefficients de transmission optique et acoustique afin de concevoir un capteur phoxonique optimisé. Nous discuterons de l'efficacité du capteur en évaluant sa sensibilité à la vitesse du son et de la lumière dans le milieu liquide environnant.

II- Présentation de la structure

L'étude porte sur une structure périodique membranaire composée d'un réseau carré de trous d'air dans une membrane en silicium. Nous allons nous intéresser à la transmission normale à la plaque de silicium perforée et plongée dans l'eau (figure 1). Les différents paramètres géométriques ne se limitent plus aux rayons d'inclusions comme dans la structure infinie mais fait intervenir un paramètre supplémentaire qui est l'épaisseur de la membrane. De ce fait, l'étude des courbes de transmission consiste en la définition d'un ensemble optimal de valeurs (h, r, a), où h est l'épaisseur de la membrane, r le rayon des inclusions et a le paramètre du réseau.

La figure 1a représente une vue à 3D de la structure périodique, finie dans la direction de propagation z et infinie perpendiculairement à savoir selon les directions x et y. La figure 1b représente la cellule élémentaire utilisée pour les calculs de simulation numérique.

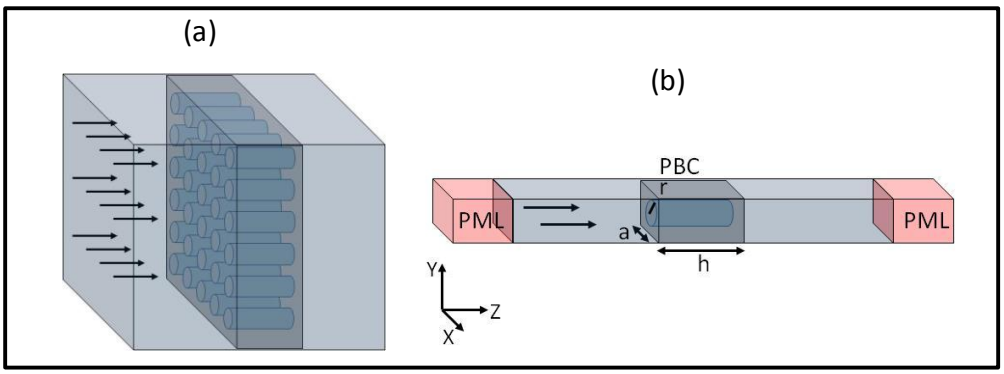


Figure1: (a) Représentation schématique d'un cristal phoxonique à 3D contenant une plaque de silicium percée de trous et plongée dans l'eau. (b) Cellule élémentaire utilisée pour le calcul de la transmission d'ondes optiques et acoustiques. Des couches parfaites absorbantes (PML) sont appliquées sur les frontières perpendiculaires à la direction de propagation, tandis que des conditions aux limites périodiques (PBC) sont appliquées dans la direction parallèle.

Tous les calculs ont été effectués à l'aide de deux codes, i.e. phononique et photonique, basés sur la méthode 3D-FDTD, mettant en jeu, respectivement, les propagations des ondes optiques et acoustiques. Dans la direction de propagation z, la taille est finie et des conditions absorbantes PML sont appliquées pour éviter les réflexions à la fois à l'interface entre le silicium et les couches absorbantes par une condition de non-réflectivité, mais également en bords de cellule grâce à l'absorption de l'onde. Dans la première partie du chapitre, les données seront exprimées en fonction du paramètre de maille a, i.e. r/a et h/a. De même, les courbes de transmission seront données en fonction de la fréquence réduite $\Omega = \omega a/2\pi c$, où c représente la célérité de la lumière en optique ou la vitesse transverse du silicium dans le volume. Au départ, les courbes de transmission seront présentés en fonction des paramètres géométriques r/a = 0.15, et h/a = 0.25 avant de discuter leurs variations. Les paramètres physiques adoptés sont les mêmes que ceux pris dans le chapitre précédent, et sont rappelés dans le tableau 1. La matrice est constituée de silicium, matériau cristallin considéré à symétrie cubique [16] ayant les constantes élastiques suivantes : $C_{11} = 16.56 \times 10^{10} (N/m^2)$ $C_{44} = 7.962 \times 10^{10} (N/m^2)$ $C_{12} = 6.39 \times 10^{10} (N/m^2)$.

Tableau 1 : Paramètres physiques des différents constituants du cristal phoxonique.

	Vitesse acoustique longitudinale (m/s)	Vitesse acoustique transversale (m/s)	Masse volumique ρ(Kg/m^3)	Indice de réfraction
silicium	8431	5844	2331	3.5
Eau	1490	0	990	1.33

III- Transmission perpendiculaire à la plaque périodique

III-1 Transmission phononique

III-1-1 Calcul des coefficients de transmission

La transmission optique extraordinaire (EOT) mise en évidence par Ebbesen et al. sur des membranes métalliques perforées par des ouvertures sub-longueurs d'onde [8] a soulevé, à nouveau, la question de la similitude entre le son et la lumière dans le cadre de la transmission d'onde. Depuis 2007, des travaux se sont intéressés à la mise en évidence de ces phénomènes pour les ondes acoustiques. Ils ont été démontrés par Christensen et al. Ainsi que par d'autres auteurs [17,18]. La mise en évidence expérimentale de tels phénomènes a été rapportée dans la référence [19]. Par la suite, plusieurs groupes ont proposé l'étude des propriétés de transmission du son à travers des plaques à fentes [20] et à trous [21]. Les résultats présentés dans cette partie concernent la transmission des phonons à travers une plaque en silicium perforée de trous plongée dans l'eau. Liu et al. [22] ont démontré lors de l'étude d'une plaque formée polyméthacrylate de méthyle percée d'un réseau carré de trous plongée dans l'eau, l'existence de modes de résonance des ouvertures couplés avec le mode incident.

Dans cette partie nous allons nous intéressé à la transmission perpendiculaire à travers une plaque en silicium. Comme mentionné dans le paragraphe précédent, l'épaisseur réduite de la plaque est h/a = 0.25 et le rayon réduit des trous r/a = 0.15 où a est le paramètre du réseau. Du point de vue numérique, la résolution des équations du mouvement se feront avec un pas de discrétisation de l'espace suivant les trois directions x, y et z égaux à Δx = Δy = Δz = a/40, ce qui assure un nombre suffisant de points pour une bonne convergence spatiale des calculs. Le pas temporel est choisi tel que $\Delta t = \frac{\Delta x}{4C_l}$, où c_l est la plus grande vitesse longitudinale utilisée dans le modèle avec une intégration de t = 2^{19} Δt pour la durée totale du calcul. La propagation se fait hors plan en tenant compte de tous les déplacements du champ élastique, U_x, U_y et U_z.

La figure 2b montre la courbe de transmission à travers la plaque percée plongée dans l'eau, calculée en fonction de la fréquence normalisée Ω dans la gamme [0, 0.4]. La courbe montre une résonance de Fano asymétrique, à savoir un pic de transmission à la fréquence réduite 0.232 au voisinage d'un zéro de transmission à 0.237. La résonance de Fano, bien définie, correspond à un mode localisé au niveau du cylindre couplé avec le mode de propagation incident. Le champ de déplacement de cette résonance de type Fano, calculé pour une onde incidente monochromatique à 0.237 est présenté sur la figure 2b. L'analyse des composantes du mode montre que le champ de déplacement U_y et U_z est fortement localisé sur les bords circulaires du trou de silicium, induisant une évanescence du champ élastique à l'intérieur du trou d'eau (voir U_y (y, z) et U_z (y, z)).

La résonance de type Fano résulte alors du couplage de l'onde incidente avec le mode localisé. L'excitation de mode propre conduit à un pic ou un zéro de transmission dans la courbe de transmission selon que l'onde incidente est en phase ou en opposition de phase avec l'oscillation du mode propre.

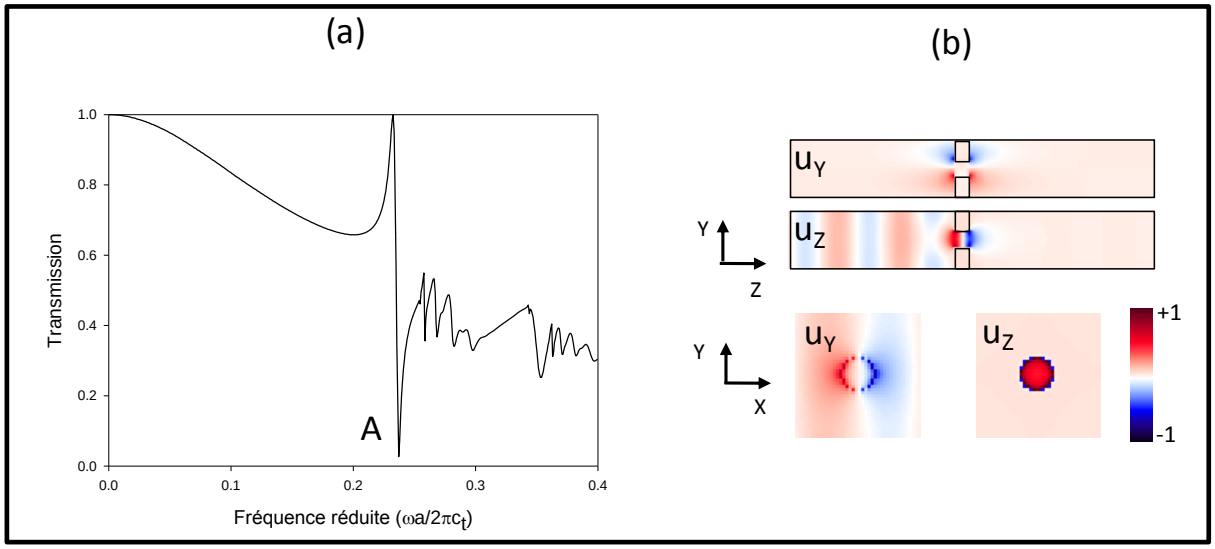


Figure 2 : (a) Courbe de transmission phononique pour une onde incidente normale à la plaque percée plongée dans de l'eau, avec les paramètres géométriques h/a = 0.25 et r/a = 0.15. (b) Calcul des composantes du champ de déplacement à la fréquence de zéro de transmission A.

III-1-2 Evolution des fréquences en fonction des paramètres géométriques

Comme on l'a constaté sur la figure 2a le mode A est parfaitement défini et bien isolé dans le spectre de transmission. Par conséquent, il représente un bon candidat dans la mise au point d'un capteur permettant la détection de la vitesse acoustique d'un liquide. Nous allons regarder

à présent comment ce zéro de transmission va évoluer dans le spectre de transmission en fonction des paramètres géométriques, à savoir r, le rayon des trous et h, l'épaisseur de la plaque. Les figures 3a et 3b montrent respectivement cette évolution. A partir de la figure 3a on remarque que l'augmentation de rayon influence peu la fréquence du mode A, qui reste autour de 0.25. La figure 3b montre l'évolution de la fréquence de mode A en fonction de la hauteur pour les deux valeurs de rayon réduit r/a = 0.15 et r/a = 0.35. Il ressort que, en augmentant h, la tendance générale est une forte variation du mode vers les basses fréquences. Cette diminution est liée à l'augmentation de la cavité formée par les inclusions d'eau. Ce résultat est en bon accord avec celui trouvé par Christensen et al. [23] lors d'une étude de la transmission acoustique extraordinaire à travers une plaque perforée de trous de taille sub-longueurs d'ondes. Dans ce travail, le milieu ambiant considéré était de l'air. En variant la hauteur de la plaque, les modes de résonances se déplacent vers les grandes longueurs d'ondes.

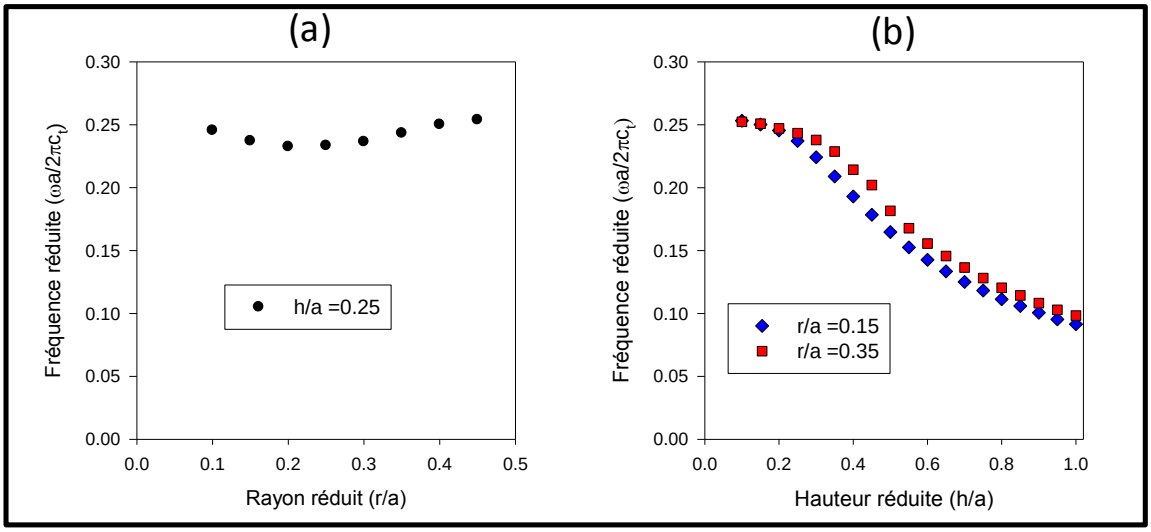


Figure 3 : Évolution de la fréquence du mode A en fonction (a) du rayon réduit r/a pour une épaisseur de plaque h/a = 0.25. (b) de la hauteur réduite h/a pour deux valeurs de rayon, r/a = 0.15 et r/a = 0.35.

III-2 Transmission photonique

III-2-1 Calcul des coefficients de transmission

L'étude de la plaque percée immergée dans l'eau est étendue au calcul de la transmission optique. Du point de vue numérique, l'espace est discrétisé de manière à ce que Δx = Δy= Δz = a/30 assure un nombre suffisant de points pour une bonne convergence spatiale des calculs. Les équations de Maxwell sont résolues avec un pas temporel $\Delta t = \frac{\Delta x}{4c}$, c représentant la

vitesse de la lumière dans le vide, et un nombre d'itération de 2^{19} permettant la convergence temporelle. Les courbes de transmission à travers le cristal sont calculées en fonction de la fréquence normalisée Ω, dans la gamme de fréquence [0, 0.8]. Le calcul de la courbe de transmission pour une onde incidente perpendiculaire à la plaque conduit également à des résonances de type Fano qui apparaissent sous forme des pics et des zéros de transmission. Comme mentionné dans la partie phononique ces résonances sont dues à un couplage de l'onde incidente et un mode localisé. Ces résonances de type Fano ont été mis en évidence dans les spectres de transmission optique pour une grande variété de structures métalliques ou diélectriques [24,25]. Récemment, ces effets ont été observés dans des structures en plaque à cristal photonique et exploitées dans divers domaines autour des filtres, miroirs et capteurs [26-29].

Le spectre de transmission est illustré sur la figure 4a avec les paramètres géométriques réduits suivants : h/a = 0.25 et r/a = 0.15. On constate que le premier mode, noté α, à la fréquence réduite de 0.417, est parfaitement défini et bien isolé, pouvant ainsi faire le pendant optique du mode phononique précédent A. La carte du champ électromagnétique à la fréquence du mode α est illustrée sur la figure 4b. Nous observons, dans ce cas, une forte localisation des champs $E_x(y,z)$ et $H_y(y,z)$ dans la plaque de silicium, dû à la forte différence d'indice avec le liquide. La résonance de Fano est alors due au couplage entre l'onde incidente et le mode de plaque. Notons que le mode est symétrique par rapport au milieu de la plaque. Le deuxième mode, à la fréquence réduite 0.541, est noté β. La figure 4c représente la carte de champs du mode β à partir de laquelle on remarque que, comme précédemment, les champs $E_x(y,z)$ et $H_y(y,z)$ sont localisés dans la plaque. Les deux modes se distinguent par une analyse de leurs symétries. En effet, nous constatons que le mode α est symétrique par rapport au plan médian de la plaque, alors que β, lui, est antisymétrique.

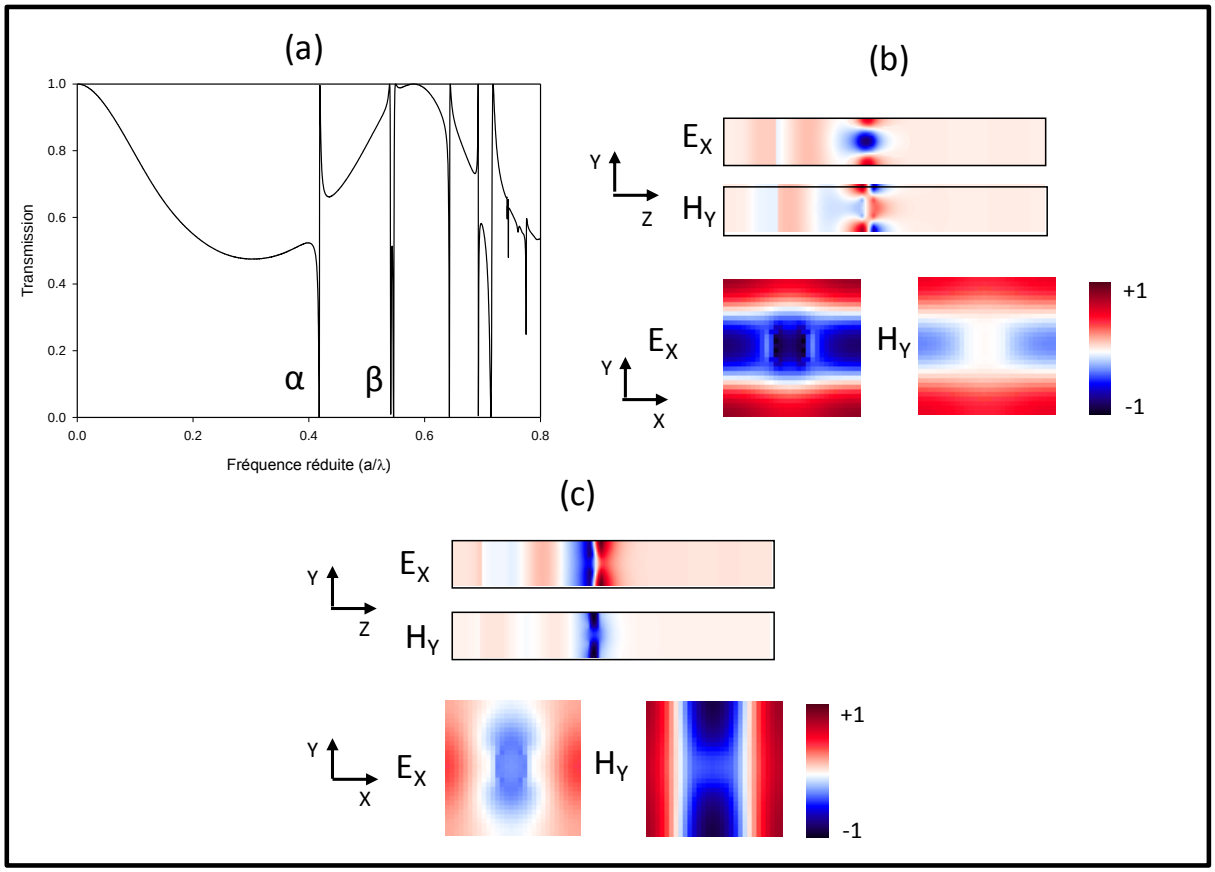


Figure 4 : (a) Courbe de transmission photonique pour une onde incidente normale à la plaque de silicium percée quand le milieu environnant est de l'eau, avec les paramètres géométriques h/a = 0.25 et r/a = 0.15. (b) et (c) Cartes des champs électromagnétiques aux fréquences réduites des zéros de transmission α et β, respectivement.

III-2-2 Evolution des fréquences des modes en fonction des paramètres géométriques

Dans la courbe de transmission de la figure 4a, plusieurs autres pics et zéros de transmission existent avec un nombre croissant au fur et à mesure que la fréquence augmente. Pour autant, de par sa résolution et son isolement fréquentiel vis à vis des autres résonances, le mode α représente un bon candidat dans l'objectif de la détermination de sa variation en fonction de la nature du liquide environnant. Le mode β sera lui aussi considéré dans certaines situations. Dans ce qui suit, l'effort sera donc porté sur ces deux modes et leur dépendance en fonction des paramètres géométriques de la structure. La figure 5 montre l'évolution de la courbe de transmission pour 3 valeurs de rayons r/a = 0.15, 0.25 et 0.35, la plaque présentant la même épaisseur h, fixée à 0.25a. On peut voir que les fréquences des modes augmentent avec le rayon des trous et les pics de résonance deviennent de plus en plus larges. Ces comportements

sont en bonne adéquation avec la diminution de l'indice de réfraction effectif de la plaque percée [30,31] et en bon accord avec le travail de El-Beheiry et al. [32] qui montre que l'augmentation des rayons des trous dans la plaque augmentent la diffusion de la lumière dans le cristal photonique conduisant ainsi à une réduction des valeurs de facteur de qualité.

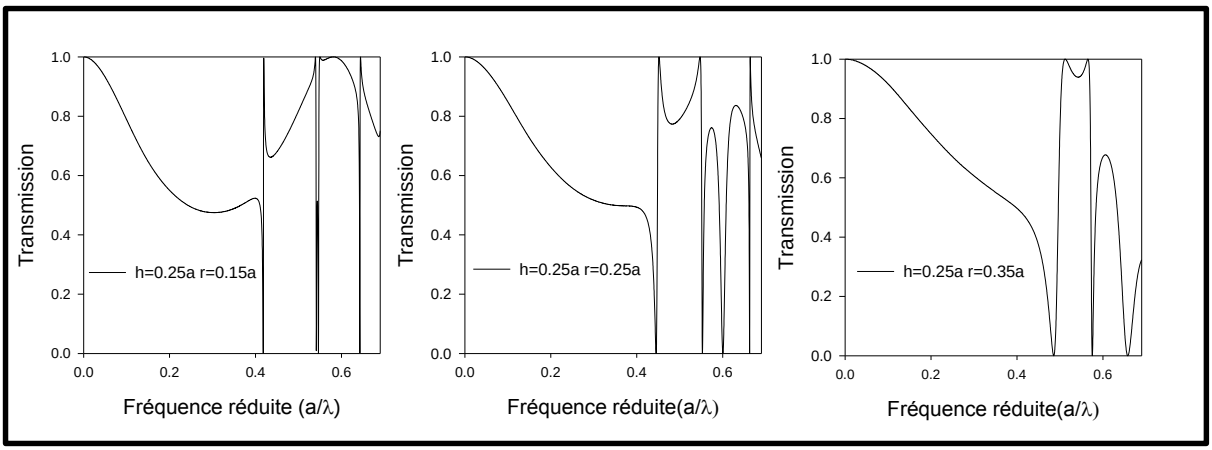


Figure 5 : Courbes de transmission pour 3 rayons différents qui montrent l'évolution du facteur de qualité avec l'augmentation du rayon.

Nous avons étudié de manière systématique l'effet du rayon des inclusions sur les zéros de transmission en calculant les courbes de transmission pour différents rayons des trous, allant de 0 à 0.45 (figure 6a). Nous avons ensuite étudié l'évolution de ces modes de résonances en fonction de la hauteur de la plaque pour deux rayons réduits r/a = 0.15 et r/a = 0.35 (figures 6b et 6c). Dans les deux cas et contrairement au cas précédent, l'augmentation de la hauteur de plaque à rayon fixe entraine une diminution des fréquences de résonance. L'explication de ce dernier comportement est à relier avec le fait que l'augmentation de la taille de la plaque, revient à augmenter de manière plus importante la quantité de silicium dans le réseau par rapport à l'eau. L'indice optique du silicium étant le plus élevé, nous observons une augmentation de l'indice de réfraction effectif conduisant à la diminution des fréquences des modes de résonance. Notons par ailleurs que l'évolution des fréquences des différents modes ne présente pas la même dynamique. Nous constatons en effet que le mode noté β décroit plus vite que α (figure 6c), entrainant un croisement entre les deux modes. Ce point est à prendre en compte dans le choix de la structure la mieux adaptée à l'élaboration du capteur.

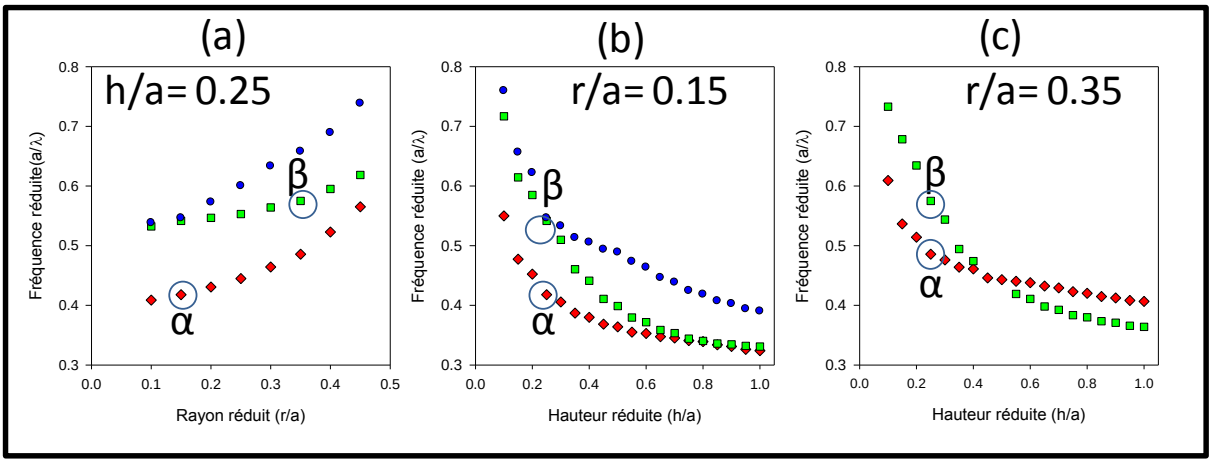


Figure 6 : (a) Évolution des premières fréquences de résonance en fonction du rayon réduit r/a pour h/a = 0.25 (b, c) Évolution des fréquences de résonance en fonction de h/a pour (b) r/a = 0.15 et (c) r/a = 0.35.

IV- Capteur phoxonique

IV-1 Choix de la structure

Comme nous l'avons souligné dans les paragraphes précédents, pour faire un capteur phoxonique, nous devons concevoir une structure à la fois phononique et photonique. Pour cette structure, les zéros et/ou les pics apparaissant dans les courbes de transmission doivent être bien isolés les uns des autres afin de permettre leur variation et leur détection en fonction de la nature du liquide environnant sur une gamme suffisamment large de fréquences. Les figures 3 et 6 représentent, respectivement, les évolutions des fréquences de résonance élastiques et optiques en fonction des paramètres géométriques h et r dans les domaines de variation $0 < r/a < 0.45$ et $0 < h/a < 1$. En phononique, nous avons obtenu un seul mode A illustré sur la figure 2a. Ce mode répond aux exigences précédentes quelles que soient les valeurs de l'épaisseur h de la plaque et du rayon r de l'ouverture. La restriction sur la géométrie de la structure va venir du côté photonique, illustré par la figure 6. Il apparaît que dans la gamme présentée figure 6a, le mode α reste isolé quelle que soit la valeur du rayon. Pour le mode β, il faut prendre un rayon réduit supérieur à 0.25. Ainsi l'efficacité du capteur vis à vis du rayon de l'ouverture sera étudiée pour deux couples de paramètres géométriques à savoir (h/a = 0.25, r/a = 0.15) et (h/a = 0.25, r/a = 0.35). Nous étudierons ensuite l'effet de la hauteur de la plaque en considérant deux hauteurs supplémentaires h/a = 0.5 et h/a = 0.9 avec les rayons réduits r/a = 0.15 et r/a = 0.35.

L'efficacité du capteur sera déterminée par sa sensibilité aux indices de réfraction optique et aux vitesses acoustiques du liquide environnant. En phononique comme en photonique, nous avons considéré un même mélange chlorure 1-Méthyle-3-octylimidazolium liquide et méthanol à différentes concentrations molaires, x. Les densités, vitesses acoustiques et indices de réfraction optiques sont rapportés dans le tableau 2 en fonction du pourcentage de solvant x d'après la référence [33].

Tableau 2 : Vitesse acoustique, la masse volumique et indice de réfraction des différents liquides d'après la référence [33].

x Méthanol	vitesse acoustique longitudinale (m/s)	Masse volumique $\rho(Kg/m^3)$	Indice de réfraction
0.000	1721	1008	1.5105
0.5589	1526	973	1.4769
0.7536	1447	939	1.4478
0.8713	1348	897	1.4127
0.9436	1237	850	1.3757
1.000	1103	782	1.3268

Les figures 7 et 8 représentent respectivement l'évolution des spectres de transmission phononique et photonique pour les différentes valeurs des paramètres physiques de l'analyte, i.e. la vitesse acoustique et l'indice de réfraction optique.

Pour les ondes élastiques, nous nous sommes intéressés à l'évolution de la fréquence de résonance du mode A pour une épaisseur de plaque constante (h/a = 0.25) et pour deux rayons des trous r/a = 0.15 (figure 7a) et r/a = 0.35 (figure 7b). Les vitesses de propagation longitudinales du son dans l'analyte varient de 1103 m/s à 1721 m/s lorsque la concentration de méthanol x passe de 0% à 1%. Pour les deux valeurs de rayon considérées, la fréquence du mode augmente avec la vitesse acoustique de l'onde. Notons que l'amplitude de déplacement du zéro de transmission du mode A est à peu prêt la même que le rayon soit grand ou petit. Il apparaît donc que l'augmentation de la taille du rayon n'a pas rendu plus sensible le capteur à la concentration de l'analyte. Le paragraphe suivant reprendra l'analyse de la sensibilité du capteur d'un point de vue quantitatif.

Pour les ondes optiques, nous nous sommes intéressés à l'évolution des modes de résonance α et β, avec, comme dans le cas phononique, l'épaisseur de plaque h/a = 0.25 et les deux rayons des trous r/a = 0.15 (figure 8a) et r/a = 0.35 (figure 8b). Les indices de réfraction optiques de l'analyte varient de1.3268 à 1.5105 lorsque la concentration de méthanol x passe de 0% à 1%. Pour les deux rayons considérés, les fréquences des modes α et β se déplacent vers les basses fréquences lorsque l'indice augmente. Le comportement vis à vis de la vitesse de l'onde optique est la même que précédemment à savoir que la fréquence du mode augmente avec la vitesse optique de l'onde. Cette tendance est en bon accord avec l'augmentation de l'indice de réfraction effectif du milieu. Notons que, d'un point de vue qualitatif, le mode β présente une dynamique de changement de fréquence plus importante que le mode α (figure 8b). Ceci laisse présager une meilleure sensibilité de ce mode que nous calculerons dans le paragraphe suivant.

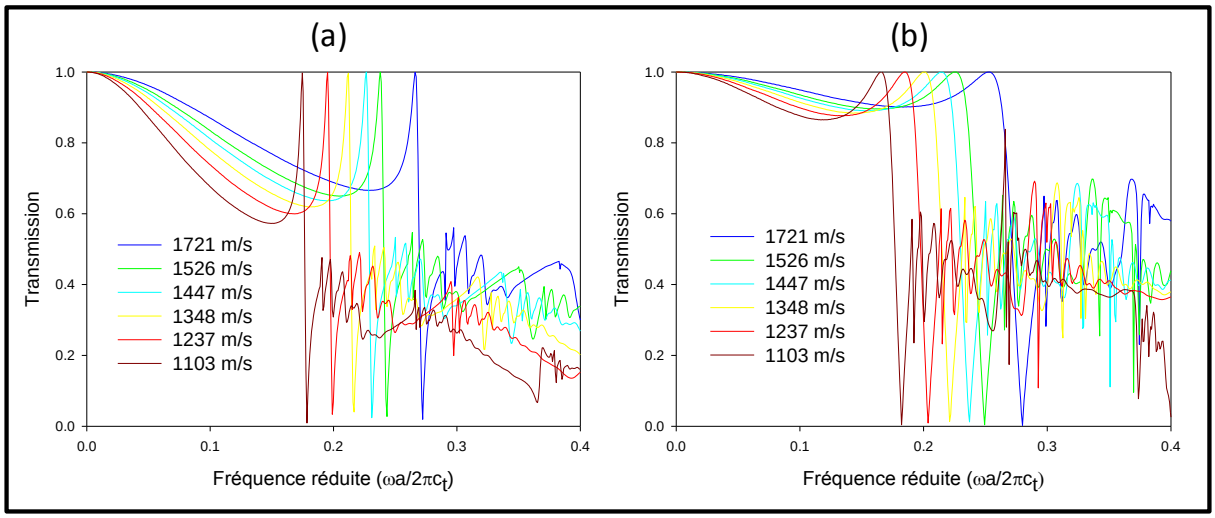
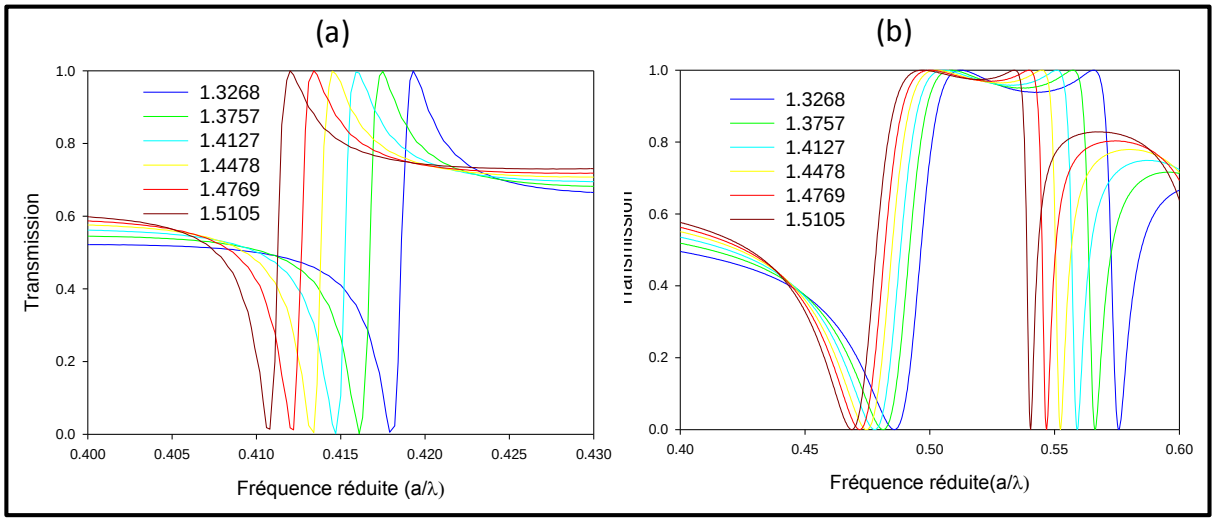


Figure 7 : (a) Évolution des spectres de transmission phononiques pour différentes valeurs de vitesses longitudinales de l'analyte remplissant le milieu environnant. Les paramètres géométriques de la plaque de silicium percée sont h/a = 0.25 et (a) r/a = 0.15, (b) r/a = 0.35.



Figures 8 : Évolution du spectre de transmission photonique pour différentes valeurs de l'indice de réfraction de l'analyte. Les paramètres géométriques de la plaque de silicium percée sont h/a = 0.25 et (a) r/a = 0.15, (b) r/a= 0.35.

VI-2 Calcul des sensibilités

Comme mentionné dans le chapitre précédent, les calculs de sensibilité se font avec des dimensions réelles car elles dépendent du choix du domaine de longueur d'onde. La fréquence réduite photonique s'exprime par le rapport λ/a, où a est le paramètre de maille et λ la longueur d'onde incidente. Ainsi, le choix du domaine de longueur d'onde conditionne la dimension de la structure. Si nous choisissons de travailler dans le domaine des télécommunications, la longueur d'onde optique sera fixée à 1.55µm. Pour avoir un pic α et β dans cette gamme de longueur d'onde, nous sommes amené à considérer une structure périodique dont le paramètre de maille est autour de a = 640 nm. La conséquence du choix du paramètre de maille se reporte sur la fréquence de travail du côté phononique, qui de fait donne une fréquence de résonance du mode A de 2.3 GHz.

Les figures 9 (a et b) reportent l'évolution de la fréquence de résonance du mode phononique A en fonction de la vitesse du son longitudinale de l'analyte, pour une épaisseur h/a = 0.25 et les rayons r/a = 0.15 (figure 9a) et r/a = 0.35 (figure 9b).

En parallèle, les figures 9 (c et d) reportent l'évolution de la fréquence de résonance des modes photoniques α et β en fonction de l'indice de réfraction de l'analyte, pour la même épaisseur de plaque h/a = 0.25 et pour les rayons r/a = 0.15 (figure 9c) et r/a = 0.35 (figure 9d).

Les sensibilités phononiques et photoniques du capteur correspondent aux pentes des courbes des figures 9. Ainsi, la connaissance des valeurs simultanées des fréquences de résonance acoustique et optique permettent de connaitre les vitesses acoustiques et indices de réfraction de l'analyte, donc à la nature du liquide.

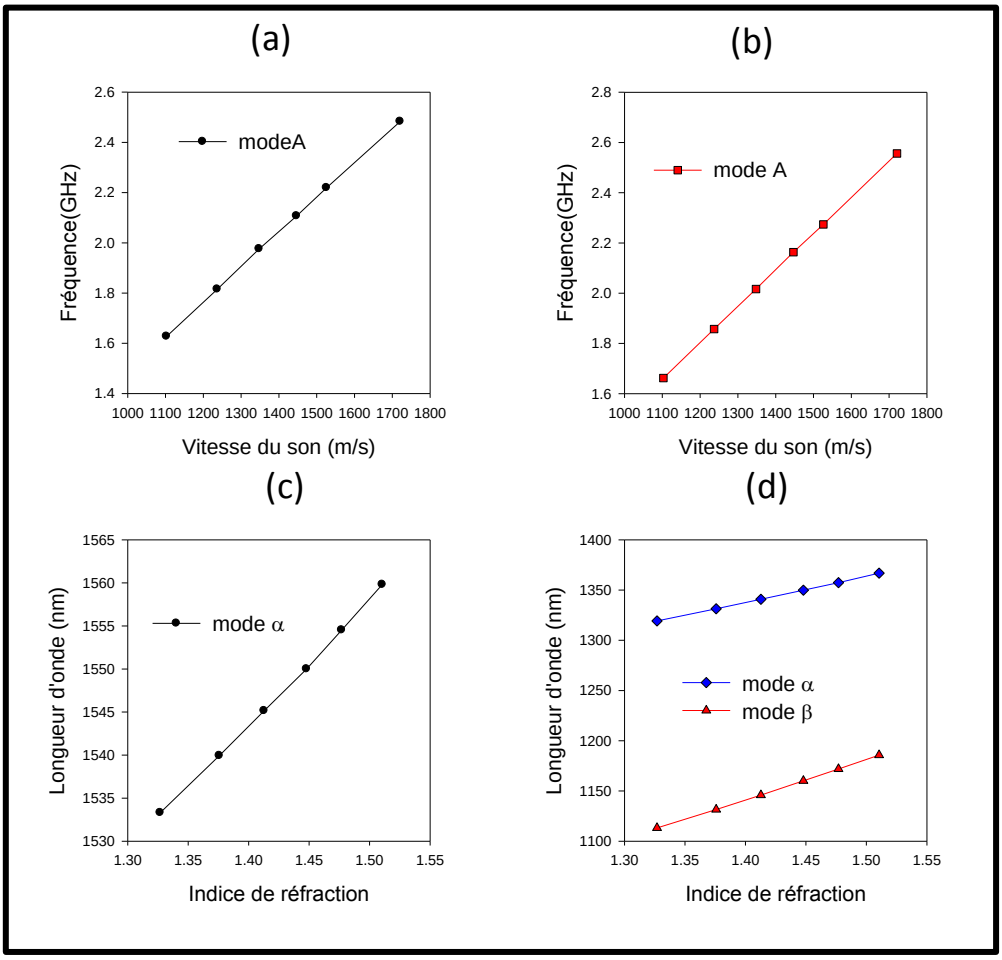


Figure 9 : (a et b) Evolution des fréquences du mode A en fonction de la vitesse acoustique de l'analyte pour h/a = 0.25 et (a) r/a = 0.15, (b) r/a = 0.35. (c) et (d) Evolution des longueurs d'onde des modes α, β en fonction de l'indice de réfraction du liquide pour h/a = 0.25 et (c) r/a = 0.15, (d) r/a = 0.35.

D'un point de vue quantitatif, le calcul des valeurs des sensibilités phononique et photonique du capteur est réalisé à partir des expressions définies dans le chapitre précédent. Nous rappelons ici leurs expressions qui correspondent aux pentes des courbes des figures 7 et 8 :

$$S^{j}_{photonic} = \frac{\Delta\lambda_j}{\Delta n_{liq}} \text{ (nm/RIU)}$$

en photonique, où RIU signifie 'Refractive Index Unit', et en phononique

$$S^{i}_{phononic} = \frac{\Delta f_i}{\Delta c_{liq}} \ (\mathrm{MHz/ms^{-1}})$$

Les résultats sont rassemblés dans le tableau 3 pour les modes phononiques A, et photoniques α et β pour les deux rayons précédent, r = 0.15a et r = 0.35a et pour trois épaisseurs h de plaques différentes, 0.25a, 0.5a et 0.9a. Il ressort de ces résultats que le mode phononique A présente une meilleure sensibilité lorsque la plaque est fine, améliorant le confinement du champ acoustique à la fréquence du mode. Comme nous l'avions signalé précédemment, la sensibilité dépend très peu du rayon de l'ouverture. Notons enfin que l'ordre de grandeur de la sensibilité phononique (ici $S^{A}_{phononic} = 1.4$) est du même ordre de grandeur que dans le cas du système à 3D du chapitre 3. En phononique, il n'est pas possible d'établir une règle générale que ce soit en fonction du rayon qu'en fonction de l'épaisseur de la plaque. En photonique pour autant, nous remarquons que, en comparaison avec les valeurs de sensibilité du chapitre précédent, elles sont maintenant largement supérieures. Pour h = 0.25a et r = 0.35a la sensibilité atteint 400 nm/RIU pour le mode β. Les résultats que nous avons trouvé sont comparables à ceux trouvés par Hang et al. [34] en étudiant numériquement et expérimentalement une plaque de Nitrure de silicium (SiN_X). Notons enfin qu'une sensibilité de 594 nm/RIU a été trouvé pour h = 0.15a et r = 0.45a pour le même mode β. Ce résultat est en bon accord avec celui trouvé par El-Beheiry [32], en utilisant une plaque de Nitrure de silicium percée de trous plongée dans l'eau.

Tableau 3 : Sensibilité phononique (PNC) et photonique (PTC) pour différents rayons (r/a) et épaisseurs (h/a).

	h/a=0.25			h/a=0.5			h/a=0.9		
r/a a=640nm	S^{A}_{PNC} MHz/ms^{-1}	S^{α}_{PTC} nm/RIU	S^{β}_{PTC} nm/RIU	S^{A}_{PNC} nm/RIU	S^{α}_{PTC} nm/RIU	S^{β}_{PTC} nm/RIU	S^{A}_{PNC} MHz/ms^{-1}	S^{α}_{PTC} nm/RIU	S^{β}_{PTC} nm/RIU
0.15	1.35	150	/	0.78	101	173	0.48	/	/
0.35	1.42	263	400	0.80	188	/	0.46	99	229

VI- Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié la transmission d'une onde acoustique et optique incidente se propageant perpendiculairement à une plaque percée d'épaisseur finie. Nous avons

démontré que, en phononique comme en photonique, le spectre de transmission présentait des résonances asymétriques de type Fano. L'origine de ces modes de résonance a été identifiée comme le résultat du couplage de l'onde incidente avec un mode localisé. En phononique, le mode est fortement confiné sur les bords circulaires du trou de silicium, induisant une évanescence du champ élastique à l'intérieur du trou d'eau. En photonique, le mode est localisé dans la plaque de silicium percée ce qui s'explique par un indice de réfraction effectif supérieur dans la plaque par rapport au milieu liquide environnant. Les paramètres géométriques, i.e. l'épaisseur de la plaque et les rayons des trous, ont été adaptés de manière à ce que les modes à l'intérieur des spectres de transmission phononique/photonique soient bien définis et suffisamment isolés les uns des autres. Le capteur ainsi défini a été testé à partir de l'analyse d'un mélange de chlorure 1-Méthyle-3-octylimidazolium liquide avec du méthanol à différentes concentrations molaires, x. Ce mélange présente à la fois une variation de la vitesse acoustique longitudinale et de l'indice de réfraction lorsque la concentration de méthanol varie. Nous avons alors montré que le cristal phononique/photonique pouvait être employée en tant que capteur phoxonique avec une très bonne sensibilité. Nous avons démontré que si nous nous référons aux vitesses de son et de lumière, les modes acoustiques et optiques se comportent de la même manière : une augmentation de la vitesse acoustique (optique) entraîne une augmentation des fréquences des modes. Nous avons proposé une nouvelle classe de capteurs phoxonique qui ont la possibilité de sonder la vitesse du son et de la lumière de liquides inconnus à partir d'une même structure.

Bibliographie

[1] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos and L. A. Kolodzjeski, Phys. Rev. B 60, 5751 (1999).

[2] E. Chow, S.Y. Lin, S.G. Johnson, P.R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, J. R. Wendt, G. A. Vawter, W. Zubrzycki, H. Hou and A. Alleman, *Three-dimensional control of light in a two-dimensional photonic crystal slab*, Nature 407, 983 (2000).

[3] Z. Zhang and M. Qiu, *Small-volume waveguide-section high Q microcavities in 2D photonic crystal slabs*, Opt. Express 12, 3988 (2004).

[4] Y. Akahane, T. Asano, B-S. Song and S. Noda, *Fine-tuned high-Q photonic-crystal nanocavity*, Opt. Express 13, 1202 (2005).

[5] U. Bog, C. L. C. Smith and M. W. Lee, *High-Q microfluidic cavities in silicon- based two-dimensional photonic crystal structures*, Opt. Lett. 33, 2206 (2008).

[6] C. L. C. Smith, U. Bog, S. Tomljenovic-Hanic, M. W. Lee, D. K. C. Wu, L. O'Faolain, C. Monat, C. Grillet, T. F. Krauss, C. Karnutsch, R. C. McPhedran and B. J. Eggleton, *Reconfigurable microfluidic photonic crystal slab cavities*, Opt. Express 16, 20 (2008).

[7] D. Yang, H. Tian and Y. Ji, *The properties of lattice-shifted microcavity in photonic crystal slab and its applications for electro-optical sensor*, Sensors and Actuators A: Physical 17, 146 (2011).

[8] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio and P. A. Wolff, *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays*, Nature 39, 667 (1998).

[9] J. Grepstad, P. Kaspar, O. Solgaard, I-R.Johansen and A. S. Sudbo. *Photonic-crystal membranes for optical detection of single nano-particles, designed for biosensor application*, Opt. Express 20, 7 (2012).

[10] Y. Nazirizadeh, F. V. Oertzen, T. Karrock, J. Greve and M. Gerken. *Enhanced sensitivity of photonic crystal slab transducers by oblique-angle layer deposition*, Opt. Express 21, 16 (2013).

[11] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec and A. C. Hladky-Hennion, *Absolute forbidden bands and waveguiding intwo-dimensional phononic crystal plates*, Phys. Rev. B 77, 085415 (2008).

[12] J. C. Hsu and T. T. Wu, *Efficient formulation for band structure calculations of two-dimensional phononic crystal plates*, Phys. Rev. B 74, 144303 (2006).

[13] A. Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi and, V. Laude, *Complete band gaps in two-dimensional phononic crystal slab*, Phys. Rev. E 74, 046610 (2006).

[14] S. Mohammadi, A. A. Eftekhar, W. D. Hunt, and A. Adibi, *High- Q micromechanical resonators in a two-dimensional phononic crystal slab*, Appl. Phys. Lett. 94, 051906 (2009).

[15] A. Salman, O. A. Kaya and A. Cicek, *Determination of concentration of ethanol in water by a linear waveguide in a 2-dimensional phononic crystal slab*, Sensors and Actuators A: Physical 208, 50 (2014).

[16] Charles Kittel, *Physique de l'état solide*, 7e édition, Dunod (1998).

[17] J. Christensen, A. I. Fernandez-Dominguez, F. de Leon-Perez, L. Martin-Moreno, and F. J. Garcia-Vidal, Nature Phys. 3, 851 (2007).

[18] L. Zhou and G. A. Kriegsmann, *Complete transmission through a periodically perforated rigid slab*, J. Acoust. Soc. Am. 121, 3288 (2007).

[19] M-H. Lu, *Extraordinary Acoustic Transmission through a 1D Grating with Very Narrow Apertures*, Phys. Rev. Lett. 99, 174301 (2007).

[20] X. Wang, *Theory of resonant sound transmission through small apertures on periodically perforated slabs*, J. Appl. Phys. 108, 064903 (2010).

[21] H. Estrada, P. Candelas, A. Uris, F. Belmar, F. J. Garcıa de Abajo, and F. Meseguer, *Extraordinary Sound Screening in Perforated Plates*, Phys. Rev. Lett. 101, 084302 (2008).

[22] F. Liu, F. Cai, Y. Ding and Z. Liu, *Tunable transmission spectra of acoustic waves through double phononic crystal slabs***,** Appl. Phys. Lett. 92, 103504 (2008).

[23] J. Christensen, L. Martin-Moreno and F. J. Garcia-Vidal, *Theory of Resonant Acoustic Transmission through Subwavelength Apertures***,** Phys. Rev. Lett. 101, 014301 (2008).

[24] U. Fano, *The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves)*, J. Opt. Soc. Am. 31, 213 (1941).

[25] S. S. Wang, R. Magnuson, J. S. Bagby and M. G. Moharam, *Guided-mode resonance in planar dielectric layer diffraction gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **7**, 1470 (1990).

[26] W. Suh and S. Fan, *Mechanically switchable photonic crystal filter with either all-pass transmission or flat-top ref lection characteristics*, Opt. Lett. 28, 1763 (2003).

[27] V. Lousse , W. Suh, O. Kilic, S. Kim, O. Solgaard and S. Fan, *Angular and polarization properties of a photonic crystal slab mirror*, Opt. Express 12, 1575 (2004).

[28] D. Yang, H. Tian and Y.Ji, *The properties of lattice-shifted microcavity in photonic crystal slab and its applications for electro-optical sensor*, Sensors and Actuators A 171, 146 (2011).

[29] K-Li Lee, S-H. Wu, C-W. Lee and P-K. Wei, *Sensitive biosensors using Fano resonance in single gold nanoslit with periodic grooves*, Opt. Express 19, 24530 (2011).

[30] X. Ye, Y. Li, J. Dong, J. Xiao, Y. Ma and L. Qi, *Facile synthesis of ZnS nanobowl arrays and their applications as 2D photonic crystal sensors*, J. Mater. Chem. C 10, 1039 (2013).

[31] C. Li, G. Hong and L. Qi, *Nanosphere Lithography at the Gas/Liquid Interface: A General Approach toward Free-Standing High-Quality Nanonets*, Chem. Mater. 22, 476 (2010).

[32] M. El Beheiry, V. Liu, S. Fan and O. Levi, *Sensitivity enhancement in photonic crystal slab biosensors*, Opt. Express 18, 22 (2010).

[33] J. Emilio. Gonzalez, L. Alonso and A Angeles Dominguez**,** *Physical Properties of Binary Mixtures of the Ionic Liquid 1-Methyl-3-octylimidazolium Chloride with Methanol, Ethanol, and 1-Propanol at T = (298.15, 313.15, and 328.15) K and at P = 0.1 MPa*, J. Chem. Eng. Data 51, 1446 (2006).

[34] M. Huang, A. Ali Yanik, T-Y Chang and H. Altug, *Sub-wavelength nanofluidics in photonic crystal sensors*, Opt. Express 17, 26 (2009).

Conclusion générale

Les cristaux photoniques sont des structures artificielles permettant de contrôler la propagation et le confinement de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde. De façon analogue, les cristaux phononiques ont été conçus pour contrôler et manipuler les ondes acoustiques et élastiques. Récemment, il a été proposé d'imaginer, de modéliser et de fabriquer des structures artificielles dites phoxoniques dans lesquelles il est possible de contrôler simultanément la propagation et le confinement des photons et des phonons.

Nous avons consacré ce travail de thèse à l'étude de nouveaux capteurs ultra-sensibles accordables phoxoniques à base de matériaux mixtes solide et fluide. Les calculs ont été effectués, en utilisant la méthode des différences finies, dans le domaine spatial et temporel (FDTD) qui permet la prise en compte des deux milieux, liquide et solide, au sein d'une même cellule élémentaire. Cette technique de résolution des équations a fait ses preuves dans l'étude des cristaux photoniques et phononiques. Elle permet de calculer, pour des structures artificielles périodiques à une, deux ou trois dimensions, des courbes de dispersion, des coefficients de transmission et des cartographies de champ. En optique, le principe consiste à discrétiser dans le domaine spatial et temporel les équations de Maxwell décrivant la propagation d'une onde électromagnétique. De manière analogue, cette méthode permet l'étude de la propagation des ondes élastiques à travers les cristaux phononiques par la discrétisation des équations d'élasticité.

Dans la première partie de ce travail nous avons étudié un cristal phononique/photonique à deux dimensions formé de trous d'air cylindrique infinis dans un substrat de silicium, à l'exception de l'inclusion centrale qui peut être remplie d'un liquide dont on veut sonder la vitesse du son et de la lumière. Dans un premier temps, nous avons étudié théoriquement la transmission des ondes élastiques et optiques à travers le cristal parfait. Nous avons montré que le calcul des courbes de transmission donnait lieu à des bandes interdites. L'infiltration d'eau dans le cylindre de la rangée centrale a permis d'insérer des modes localisés de fréquence adaptable à l'intérieur des bandes interdites. Leur origine physique a été identifiée à des modes de résonance liés à la présence du cylindre d'eau. En phononique, les modes correspondants sont fortement confinés dans les trous d'eau et les solutions sont des dérivées des fonctions de Bessel d'un cylindre infini d'eau. En photonique, les modes ne sont pas seulement confinés dans le trou rempli d'eau mais s'étendent également à proximité du défaut.

Ensuite nous avons étudié l'évolution de ces modes en fonction des paramètres géométriques de l'inclusion centrale. La taille du trou d'eau a été optimisée de manière à ce que les fréquences des modes soient bien définies et suffisamment isolées les unes des autres tout en ayant un haut facteur de qualité. En modifiant le liquide à l'intérieur de la cavité, nous avons montré que la fréquence des modes de résonance dépendait de la nature du liquide inséré. Nous avons ainsi défini un capteur photonique/phononique sensibles aux vitesses du son et de la lumière permettant la détermination d'un liquide inconnu. Les caractéristiques du capteur ont également été évaluées. Les calculs de transmission donnent une information quantitative sur les variations de l'indice de réfraction optique et de la vitesse du son en fonction de l'analyte introduit. Les principales grandeurs donnant les performances des capteurs phoxoniques sont le facteur de qualité Q, la sensibilité S et la figure de Merit, FoM. L'efficacité du capteur phononique/photonique a été examinée pour deux tailles de cavité. Nous avons trouvé que le rayon le plus petit offrait une meilleure sensibilité en phononique tandis que le rayon le plus grand donnait la plus grande sensibilité photonique.

Nous avons dans la première partie de la thèse proposé une nouvelle classe de capteur doublement sensible aux ondes acoustiques et optiques pouvant sonder les vitesses de la lumière et du son d'un liquide inconnu dans une même structure. Nous avons ainsi montré comment cette structure périodique permet d'accéder à la fois aux propriétés optiques (indice de réfraction) et acoustiques (vitesse longitudinale de l'onde) d'un liquide que l'on cherche à identifier.

Dans la deuxième partie du manuscrit, nous avons étudié la transmission des ondes électromagnétiques et acoustiques en incidence perpendiculaire à une plaque de silicium perforée périodiquement de trous et plongée dans l'eau. Nous avons montré l'existence de pics et de zéros dans les spectres de transmission des ondes acoustiques et optiques pouvant être décrits en termes de résonances asymétriques de type Fano. L'origine de ces modes de résonance a été identifiée comme le résultat du couplage de l'onde incidente avec un mode localisé. En phononique, le mode est fortement confiné sur les bords circulaires du trou de silicium, induisant une évanescence du champ élastique à l'intérieur du cylindre d'eau. En photonique, le mode est confiné dans la plaque de silicium percée qui se comporte comme un milieu effectif d'indice supérieur au milieu liquide environnant. Les paramètres géométriques, à savoir l'épaisseur de la plaque et les rayons des trous, ont été adaptés de manière à ce que les modes à l'intérieur des spectres de transmission phononique/photonique soient bien définis et suffisamment isolés les uns des autres. La modification de la nature du milieu liquide environnant conduit à une modification des fréquences de résonance de type Fano.

L'efficacité du capteur ainsi défini a été évaluée à partir de l'analyse d'un mélange à différentes concentrations. Nous avons alors montré que le cristal phononique/photonique pouvait être employé en tant que capteur phoxonique avec une très bonne sensibilité.

Pour les deux structures étudiées, nous avons démontré qu'en terme de vitesse, les modes acoustiques et optiques se comportaient de la même manière : une augmentation de la vitesse acoustique (optique) entraîne une augmentation des fréquences des modes.

En perspective, nous souhaitons étudier le couplage des deux types d'onde à l'intérieur de la cavité liquide. Au delà de l'étude acousto-optique en tant que tel, de nouvelles propriétés pourraient ainsi être mis en évidence et conduire, par exemple, à une exaltation des caractéristiques du capteur.

Résumé

Dans ce travail, nous étudions théoriquement les potentialités d'un cristal artificiel périodique à base de silicium, simultanément phononique-photonique, dit cristal phoxonique, pour les applications de détection de liquide. Deux types de propagation de l'onde incidente par rapport au cristal phoxonique ont été considérées, dans le plan puis hors du plan de symétrie. La première structure est un cristal phoxonique bidimensionnel, composé de trous d'air dans un substrat de silicium dans lequel une rangée de trous est remplie d'un liquide. Dans la deuxième géométrie nous avons étudié la transmission normale à une plaque de silicium perforée périodiquement de trous et plongée dans l'analyte. Dans chaque cas, l'existence de caractéristiques bien définies dans les spectres de transmission acoustiques et optiques est mise en évidence. Nous évaluons la sensibilité des pics et zéros de transmission obtenus en fonction de la vitesse acoustique et de l'indice de réfraction optique du milieu liquide. Les conditions géométriques sont étudiées et discutées dans le but d'optimiser la sensibilité du capteur phoxonique à la fois aux ondes acoustique et optique. Nous avons ainsi proposé une nouvelle classe de capteurs phoxoniques capables de détecter avec une grande sensibilité la vitesse de la lumière et du son de liquides inconnus dans une même structure.

Abstract

In this work we study theoretically the potentiality of dual phononic-photonic structure, the so-called phoxonic crystal, for liquid sensing applications. Two geometries are considered that can be divided in two sets, depending on the direction of propagation of the incident waves with respect to the phononic/photonic crystal, namely in-plane and out-of-plane. In the first configuration, we study the in-plane transmission through a two-dimensional crystal made of cylindrical holes in a Si substrate where one row of holes is filled with a liquid. In the out-of-plane configuration, we study the transmission normal to a periodically perforated silicon slab when the surrounding medium is a liquid. In both cases, we investigate the existence of well-defined features, as peaks or dips, in the acoustic and optical transmission spectra and estimate their sensitivity to the sound velocity or refractive index of the liquid environment. The geometrical conditions of the cavity are studied with an aim of optimizing the phoxonic sensitivity of the sensor at the same time for the acoustic and optical wave. We have proposed a new class of phoxonic sensors which have the possibility to probe the light and sound velocity of unknown liquid in a same structure.