



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

# MÉMOIRE DE MASTER

FILIÈRE: Physique

SPÉCIALITÉ: Physique de l'interaction rayonnement matière

Présenté par:

**BRAIK Macilia**

---

Modélisation de structures périodiques photoniques en vue  
de concevoir un détecteur de température

---

Soutenu le 10/07/2017, devant le jury composé de:

ZEMIRLI	Mourad	Professeur	Président
BOUZAR	Hamid	Professeur	Examineur
MEZEGHRANE	Abdelaziz	Maître de Conférences	Encadreur

## ***Remerciements***

*Ce stage de master a été effectué au laboratoire de physique et chimie quantique LPCQ de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. A cet effet, je tiens à remercier les chercheurs, professeurs et doctorants y travaillant et à leur tête son directeur le professeur Hamid Bouzar pour leur accueil chaleureux et pour avoir fait en sorte que le travail au sein du laboratoire soit le plus agréable possible.*

*je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur Abdelaziz Mezeghrane pour le bon suivi de mon travail, en m'orientant et en m'encourageant durant ces quelques mois de stage. Aussi, au professeur Abderrahmane Belkhir pour sa disponibilité et son aide inestimable apportée lors de mon travail.*

*Mes remerciements sincères au professeur Mourad Zemirli de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de thèse et au professeur Hamid Bouzar pour avoir accepté d'examiner ce travail.*

*Je remercie, également, le corps enseignant de la faculté des sciences et en particulier du département physique et son chef Monsieur Mahdi Hamidi pour le savoir transmis durant les années de formation de Licence et Master.*

*Enfin, je remercie mes amis et ma famille, surtout mon père, ma mère, mon frère et ma sœur pour qui les mots ne suffisent pas pour leur dire tout ce qu'ils représentent pour moi.*

## Résumé

Nous avons étudié, par simulation FDTD, la sensibilité à la température des structures photoniques périodiques 1D qui se traduit par un décalage de la longueur d'onde de résonance Fano observé sur les spectres de transmission ou réflexion. Les structures considérées consistent en un agencement périodique de motifs métalliques sur un substrat de Niobate de Lithium. L'effet de la température se traduit par la variation de l'indice de réfraction du Niobate de Lithium. Cette variation est prise en compte dans le modèle de dispersion de Sellmeier et par les effets pyroélectrique et électro-optique liés au  $LiNbO_3$ . Nous avons montré que ces effets sont à l'origine du shift observé de la résonance Fano et que le modèle de Sellmeier ne peut expliquer. Une étude paramétrique (géométrique) de nos structures a permis d'obtenir une sensibilité moyenne de  $0.76nm/^\circ C$ .

## Abstract

We studied, through FDTD simulations, the temperature sensitivity of 1D-periodic photonic structures shown by the shift of the wavelength of the Fano resonance on a transmission or reflexion spectra. The structures are made of an arrangement of a metallic pattern on a Lithium Niobate substrat. The effect of the temperature is traduced by the variation of the refractive indice of Lithium Niobate. This variation is taken into account in the dispersion model of Sellmeier and by the pyroelectric and electro-optic effects of  $LiNbO_3$ . We demonstrated that these effects are at the origin of the shift observed of the Fano resonance that the Sellmeier model couldn't explain by itself. A parmetric study of our structures permitted the observation of an average sensitivity of  $0.76nm/^\circ C$ .

# Table des matières

Table des figures	vi
Introduction générale	1
<b>1 Généralités</b>	<b>3</b>
1.1 Cristaux photoniques	3
1.2 Propriétés du Niobate de Lithium	4
1.2.1 Effet électro-optique linéaire	5
1.2.2 Effet pyroélectrique	6
1.3 Résonance Fano	7
1.3.1 Définition et formule de Fano associée	7
1.3.2 Résonance Fano dans les cristaux photoniques	9
1.4 Conclusion	9
<b>2 Outils de modélisation numérique</b>	<b>10</b>
2.1 Introduction	10
2.2 Principe de la FDTD	10
2.3 Stabilité et dispersion numériques	13
2.4 Conditions aux limites	13
2.5 Conclusion	14
<b>3 Étude de la sensibilité à la température de la résonance Fano dans les structures métallo-diélectriques</b>	<b>15</b>
3.1 Prise en compte simultanée des modèles de dispersion de Sellmeier et de Drude à deux points critiques dans le code $2D - FDTD$	15
3.2 Tests de validation	17
3.3 Étude de structures dédiées à la détection de température	18
3.3.1 Excitation de la résonance Fano	19

3.3.2	Analyse de la sensibilité à la température des structures modélisées par le modèle de Sellmeier . . . . .	20
3.4	Analyse de la sensibilité de détection en exploitant les propriétés intrinsèques du $LiNbO_3$ . . . . .	21
3.4.1	Calcul de bandes photoniques . . . . .	22
3.4.2	Cartographies du champ électrique . . . . .	23
3.4.3	Étude de la sensibilité de la résonance Fano à la température . . . . .	23
3.5	Conclusion . . . . .	26
	<b>Conclusion générale</b>	<b>27</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>27</b>

# Table des figures

1.1	Images d'un cristal photonique en présence d'un guide d'onde (Gauche : vue de dessus. Droite : vue en coupe)[5] . . . . .	4
1.2	Structure cristalline du $LiNbO_3$ [13]. . . . .	5
1.3	Illustration de la formule de Fano comme une superposition d'une Lorentzienne d'un niveau discret avec un fond continue [19] . . . . .	8
1.4	Profils Fano normalisés avec un pré-facteur $1/(1+q^2)$ pour différentes valeurs du paramètre asymétrique $q$ [19] . . . . .	8
2.1	Cellule élémentaire de Yee à 3D. . . . .	11
2.2	Schéma montrant l'utilisation de la méthode des différences centrées pour les dérivations spatiales et celle de saute-mouton pour le temps. . . . .	12
2.3	Position des conditions PML et périodiques (PBC) dans les calculs FDTD [27]. . . . .	14
3.1	Variations de l'indice de réfraction du $LiNbO_3$ en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de température . . . . .	16
3.2	(a) Spectre de transmission normalisée. (b) Structure composée d'une bicouche plongée dans l'air. . . . .	17
3.3	Structure diffractante composée d'un CP 1D périodique déposé sur une couche de LN, elle-même supportée par un substrat en verre . . . . .	18
3.4	Transmissions normalisées à travers la structure diffractante de la figure 3.3. . . . .	18
3.5	(a) et (b) structure à CP 1D de période $a$ et $2a$ , respectivement, sur un substrat en $LiNbO_3$ . (c) Calcul de mode propre au point $\Gamma$ et (d) au point $X$ de la structure (a) révélant un mode à 1400nm qui se retrouve, en doublant la période, au point $\Gamma$ de la structure (b). . . . .	19
3.6	Transmission et réflexion normalisée : (a) de la structure de période $a$ et (b) de la structure de période $2a$ . . . . .	20
3.7	Transmission et réflexion normalisées . À gauche, pour une température de 30 °C et à droite pour une température de 60 °C. . . . .	21

3.8	Distribution de l'intensité du champ électrique à $\lambda = 1400nm$ . . . . .	21
3.9	Structures modélisées et leurs diagrammes de bande respectifs : (a) structure non perturbée et son diagramme de bande $\omega(k)$ en (c). (b) structure perturbée 1D et son diagramme de bande en (d). . . . .	22
3.10	Spectre de transmission en fonction de la longueur d'onde de : (a) la structure non-perturbée et (b) la structure perturbée. . . . .	23
3.11	Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique (fond coloré) et distribution spatiale du vecteur de Poynting (flèches blanches) : (a) au pic de résonance $\lambda = 1088nm$ , (b) à longueur d'onde juste avant la résonance $\lambda = 1084nm$ et (c) à la longueur d'onde juste après la résonance $\lambda = 1092nm$ . . . . .	24
3.12	a) Spectres de transmission normalisée pour différentes valeurs de température. b) variation de la longueur d'onde de résonance en fonction de la température. . . . .	25

# Introduction générale

Manipuler, contrôler et orienter la lumière sur des dimensions de l'ordre de sa longueur d'onde, voir inférieure, reste un défi majeur de l'optique et de l'électro-optique. Un pas important a été franchi depuis 1987 grâce aux cristaux photoniques découverts par Yablonovitch [1]. En structurant à 3D des matériaux diélectriques ou métallo-diélectriques, on peut obtenir des structures à bandes interdites photoniques qui constituent des miroirs dans toutes les directions. L'introduction de défauts dans ces structures donne lieu à des cavités ou des guides d'ondes qui peuvent, par exemple, intégrer des virages très compacts. Ils laissent entrevoir de nouvelles possibilités dans le domaine des composants d'optique intégrée, des sources optiques et des systèmes micro-ondes.

Compte tenu de l'attrait sans cesse grandissant des cristaux photoniques, de nouvelles structures sont récemment développées, offrant des perspectives très prometteuses en vue de concevoir des capteurs sensibles à la détection et qui suscitent une demande croissante dans plusieurs domaines tels que l'industrie des hydrocarbures, la géophysique, le domaine militaire, les transports, les télécommunications, l'environnement ou encore en biomédical [2]. Ainsi, la lumière se trouve être incroyablement utile à la mesure de différentes grandeurs physiques comme la température, la pression ou le champ électrique. Les détecteurs photoniques constituent de bons candidats aux nouvelles générations de détecteurs de part leurs importante sensibilité, large bande de fonctionnement, taille compacte, etc. La majorité des variables mesurées lors des investigations et recherches scientifiques sont dépendantes de la température. Dans ce travail, on étudie des structures photoniques à des fins de détection de température.

Ce mémoire de master s'articule autour de trois chapitres :

Le premier est consacré au rappel de quelques notions utiles sur les cristaux photoniques, le Niobate de Lithium qui est un matériau de choix pour de multiples applications dans la physique de l'interaction rayonnement-matière et notamment la détection et mesure de quantités physiques comme la température [3], et la résonance Fano qui sera exploitée comme un indicateur de la sensibilité à la température.

Le second chapitre présente succinctement la méthode des différences finies dans le domaine temporelle FDTD employée pour les calculs de spectres de transmission et réflexion, des carto-



graphies de champ électromagnétique et de diagrammes de dispersion photonique.

Le troisième et dernier chapitre est dédié à la modélisation par FDTD de structures périodiques à 1D, utiles à la conception de capteurs de température et dont le spectre de transmission est caractérisé par une résonance Fano au profil asymétrique net, en se basant d'abord sur l'équation de Sellmeier décrivant l'indice de réfraction du Niobate de Lithium qui compose ces structures puis en exploitant les caractéristiques électriques et optiques du substrat supportant ces structures périodiques.

Le manuscrit se termine par une conclusion générale.

# Chapitre 1

## Généralités

Dans ce chapitre, nous donnerons un aperçu des concepts théoriques nécessaires à ce travail de mémoire. Ainsi, on fera un bref rappel sur les cristaux photoniques, puis on énoncera les caractéristiques du Niobate de Lithium, qui est utilisé dans notre étude, en détaillant en particulier l'effet électro-optique et la pyroélectricité. Enfin, on présentera la résonance Fano et sa formulation mathématique, établie par le physicien italien Ugo Fano. Cette résonance sera exploitée comme indicateur de la sensibilité à la température des structures étudiées.

### 1.1 Cristaux photoniques

La notion de Cristaux photoniques (CP) repose sur l'analogie entre le comportement d'un électron dans le potentiel périodique créé par les atomes d'un réseau cristallin et celui d'un photon placé dans un milieu dont la constante diélectrique présente une structuration périodique [4]. Ce sont des cristaux artificiels très promettant pour la miniaturisation des dispositifs de l'optique intégrée et l'amélioration de l'interaction rayonnement-matière. La périodicité de l'indice de réfraction dans les CP offre une grande liberté dans la relation de dispersion optique, particulièrement dans l'existence de bandes interdites photoniques (BIP) : une plage de fréquence optique où l'onde ne se propage pas dans le matériau. Les CP sont indépendants du matériau, on peut les fabriquer avec presque tout type de matériau en s'aidant des techniques modernes de nano-fabrication. De plus, si un guide d'onde y est incrusté (par gravure par exemple), la lumière ne pourrait s'échapper du cristal photonique mais serait guidée le long de ce défaut. Des dispositifs multifonctionnels peuvent ainsi être taillés avec différentes structures de CP : des détecteurs, filtres ou modulateurs peuvent être conçus à base de cavités dans des cristaux photoniques. Un exemple de structuration périodique d'un matériau en présence d'un guide d'onde est illustré par la figure 1.1.

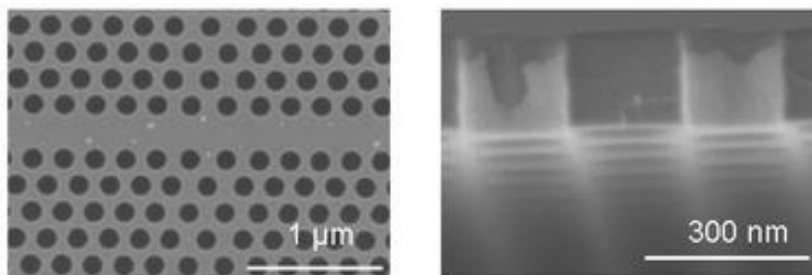


Figure 1.1 – Images d’un cristal photonique en présence d’un guide d’onde (Gauche : vue de dessus. Droite : vue en coupe)[5]

Il existe plusieurs types de cavités photoniques qu’on peut obtenir en créant un défaut de structure supportant un mode propre dans la BIP [6] ou en perturbant la symétrie de la structure pour pouvoir exciter un mode qui se trouve en bord de zone possédant une vitesse de groupe faible [7]. La présence de mode à faible vitesse de groupe combinée à la flexibilité de la dispersion de la structure et au confinement de la lumière font des CP de bons candidats au développement de capteurs ayant une bonne sensibilité. Les capteurs à base de cristaux photoniques fonctionnent grâce à la possibilité de modification de leurs propriétés optiques par une grandeur physique externe comme le champ électrique ou magnétique, la température, etc.

## 1.2 Propriétés du Niobate de Lithium

Le  $LiNbO_3$  avec ses diverses caractéristiques se présente comme un excellent candidat pour la photonique et permet de répondre aux besoins actuel et future dans divers domaines et particulièrement les télécommunications. À ce jour, ses applications et ses perspectives sont nombreuses. Ce cristal permet la réalisation de composants pour l’optique moderne tels que des modulateurs de fibre optique [8], des filtres électro-optiques [9] ou encore des détecteurs chimiques [10].

Ce matériau est chimiquement très stable à température ambiante, peu sensible à l’humidité et suffisamment dur pour être manipulé facilement [11]. Le processus le plus courant pour son élaboration artificielle est celui de Czochralski [12] ou une de ses variantes. Cette technique développée dans les années 60 consiste à faire un tirage à partir d’un germe monocristallin au contact d’un bain contenant du  $LiO_2$  et du  $Nb_2O_5$  en fusion. Cette méthode de croissance permet la fabrication de cristaux très homogènes avec d’excellentes qualités optiques même lorsque le poids des cristaux atteint plusieurs kilogrammes.

La structure cristalline du Niobate de Lithium est rhomboédrique (trigonale) de groupe ponctuel  $3m$  (voir figure 1.2). Cette classe de symétrie est non centro-symétrique, *ie.* absence de centre d’inversion, ce qui engendre d’importantes propriétés comme les effets électro-optiques.

En outre, il possède plusieurs effets tels que : l'effet piézoélectrique, l'effet ferroélectrique, l'effet optique non-linéaire, l'effet photovoltaïque ou encore l'effet pyroélectrique.

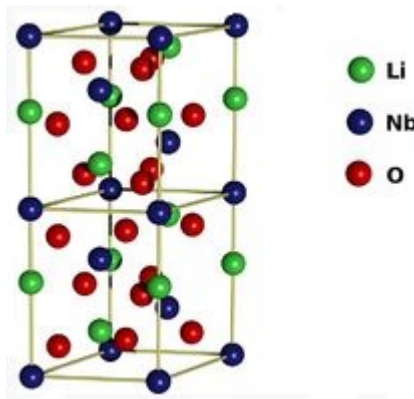


Figure 1.2 – Structure cristalline du  $LiNbO_3$  [13].

Le Niobate de Lithium est un matériau anisotrope biréfringent (uniaxe) décrit par deux indices de réfraction :  $n_e$  indice extraordinaire (le champ polarisé selon l'axe optique principal noté C) et  $n_o$  indice ordinaire (le champ polarisé perpendiculairement à l'axe C). La variation de ces indices en fonction de la longueur d'onde du champ électromagnétique, de la température et de la composition du cristal est donné par l'équation de Sellmeier dont l'expression généralisée a été déterminée par U. Beltzer et K. Scherlab [14]. Cette dernière décrit relativement bien ces dépendances dans le domaine de transparence du Niobate de Lithium qui s'étend sur le domaine de longueur d'onde de 350 nm à 5000 nm couvrant tout le domaine du visible et du proche infra-rouge [11], offrant une large fenêtre d'exploitation dans diverses applications en photonique.

Dans ce mémoire, le  $LiNbO_3$  est choisi comme matériau de base pour des applications dans le domaine de la détection de température grâce à son effet électro-optique important et sa pyroélectricité qui engendrent des variations de l'indice de réfraction qui ne sont pas prises en compte dans le modèle de Sellmeier.

### 1.2.1 Effet électro-optique linéaire

Lorsqu'un champ électrique traverse un milieu optique, la distribution des électrons est modifiée de telle sorte que la polarisation et par conséquent les indices de réfraction changent de façon anisotrope.

L'effet électro-optique (EO) est défini comme étant la dépendance de l'indice de réfraction avec un champ électrique externe [15]. On distingue l'effet électro-optique linéaire (dépendance

linéaire du champ électrique) mis en évidence par F. Pockels et l'effet électro-optique quadratique (dépendance selon le carré du champ électrique ) découvert par J. Kerr.

L'effet Pockels est le plus exploité dans le Niobate de Lithium pour la conception des modulateurs ou des capteurs.

À partir de la définition de l'effet EO linéaire, la variation de l'indice de réfraction est donnée par :

$$\Delta \left( \frac{1}{n^2} \right)_{ij} = \sum_k r_{ijk} E_k \quad (1.1)$$

où  $r_{ijk}$  représente les éléments du tenseur EO et  $E_k$  les composantes du champ électrique.

Pour le  $LiNbO_3$ , le tenseur EO peut-être simplifié grâce aux symétries de la maille cristalline. Comme c'est un cristal trigonal  $3m$  et en considérant l'axe  $z$  comme l'axe optique  $C$  du cristal dans le repère  $xyz$ , les coefficients  $r_{ijk}$  sont donnés comme suit :

$$r_{ijk} = \begin{pmatrix} 0 & -r_{22} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{13} \\ 0 & 0 & r_{33} \\ 0 & r_{51} & 0 \\ r_{51} & 0 & 0 \\ -r_{22} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Avec les notations  $ij$  :  $11 = 1$ ,  $22 = 2$ ,  $33 = 3$ ,  $23 = 32 = 4$ ,  $13 = 31 = 5$ ,  $12 = 21 = 6$

On constate que l'effet Pockels dans ce milieu se caractérise par quatre coefficients EO  $r_{13} = 10 \text{ pm/V}$ ,  $r_{22} = 6.7 \text{ pm/V}$ ,  $r_{33} = 32.2 \text{ pm/V}$  et  $r_{51} = 32.6 \text{ pm/V}$  [16].

Particulièrement, en appliquant un champ externe le long de l'axe  $z$  du cristal ( $C \parallel z$ ), le milieu devient uniaxial et l'indice extraordinaire est associé au coefficient EO  $r_{33}$  et l'indice ordinaire au coefficient  $r_{13}$ . Les variations d'indices, ordinaire  $\Delta n_o$  et extraordinaire  $\Delta n_e$ , induites sont données par :

$$\Delta n_o = -\frac{1}{2} n_o^3 r_{13} E_z \quad (1.3)$$

$$\Delta n_e = -\frac{1}{2} n_e^3 r_{33} E_z \quad (1.4)$$

L'effet électro-optique est plus important en polarisation extraordinaire qu'en polarisation ordinaire vu que le coefficient  $r_{33}$  est supérieur au coefficient  $r_{13}$  et que les indices  $n_e$  et  $n_o$  diffèrent peu.

### 1.2.2 Effet pyroélectrique

La pyroélectricité est la capacité qu'ont certains cristaux à développer une variation de leur polarisation spontanée lorsqu'ils sont soumis à une variation de température. Cette modification

de la polarisation induit une différence de potentiel temporaire qui tend à disparaître après un temps de relaxation diélectrique[17] .

Puisque la pyroélectricité est liée à la variation de la polarisation spontanée à cause de la température, certains matériaux pyroélectriques sont également ferroélectriques, comme le Niobate de Lithium. Dans ce cas le caractère pyroélectrique n'existe qu'en dessous de la température de Curie ( $T_c = 1150^\circ C$  pour le Niobate de Lithium) où le cristal est encore polaire.

Dans le  $LiNbO_3$ , la polarisation spontanée dirigée suivant l'axe optique C peut être modifiée en variant la température du cristal, c'est le principe lié à l'effet pyroélectrique caractérisé par son coefficient pyroélectrique  $P$ . En effet, lorsqu'on varie la température de ce matériau de  $\Delta T$  un déplacement relatif des atomes de Lithium et de Niobium par rapport à la couche d'oxygène apparaît. C'est ce déplacement qui modifie la polarisation spontanée. La relation entre le coefficient pyroélectrique, la polarisation spontanée et la température est donnée par :

$$P = \frac{\partial p_s}{\partial T} \quad (1.5)$$

Cette variation de température induit également un champ dit pyroélectrique (noté  $E_{py}$ ) qui est donné par :

$$E_{py} = -\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} P \Delta T \quad (1.6)$$

où  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_r$  sont la permittivité du vide et la permittivité relative du  $LiNbO_3$  respectivement,  $\Delta T$  la variation de température du cristal et  $P$  le coefficient pyroélectrique qui vaut pour le  $LiNbO_3 - 6 \cdot 10^{-5} C m^{-2} K^{-1}$  pour des températures avoisinant les  $20^\circ C$ .

On constate que ce champ est très intense pour une faible variation de la température. A titre d'exemple, une variation de température de  $10^\circ C$  engendre un champ dans le cristal de l'ordre  $E_{py} = 21 \text{ kV/cm}$ .

## 1.3 Résonance Fano

### 1.3.1 Définition et formule de Fano associée

Comparée à la forme conventionnelle symétrique de la lorentzienne, la résonance Fano est surtout citée dans la description des résonances asymétriques qui sont le résultat d'interférence constructive ou destructive entre états discrets de résonance et un continuum. Ce phénomène et le mécanisme sous-jacent sont observés dans une grande variété de structures nanophotoniques et systèmes quantiques comme les boîtes quantiques, les cristaux photoniques, la plasmonique et les méta-matériaux. Cette résonance permet d'envisager divers dispositifs photoniques tels que les filtres optiques, les modulateurs et les détecteurs, des lasers, et autres dispositifs à lumière lente ou non linéaire [18].

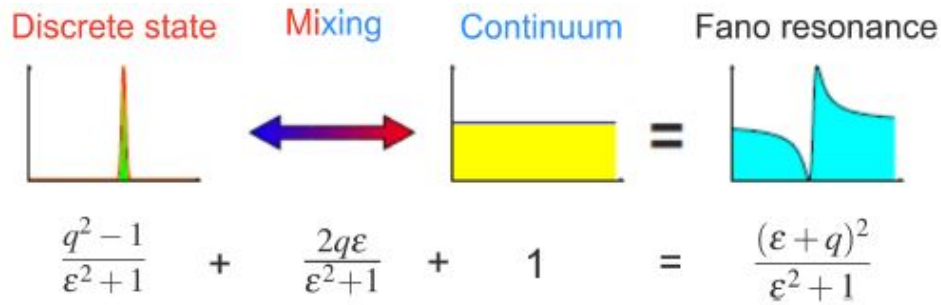


Figure 1.3 – Illustration de la formule de Fano comme une superposition d’une Lorentzienne d’un niveau discret avec un fond continue [19]

C’est U. Fano qui, pour la première fois, a suggéré une explication théorique à l’origine du profil asymétrique dans plusieurs systèmes physiques en se basant sur le principe de superposition [20]. Le processus physique est mis en évidence schématiquement dans la figure 1.3. La complexité de ce phénomène physique fut encapsulé dans quelques paramètres clés où la forme du profil de résonance est décrite par :

$$\sigma = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} \quad (1.7)$$

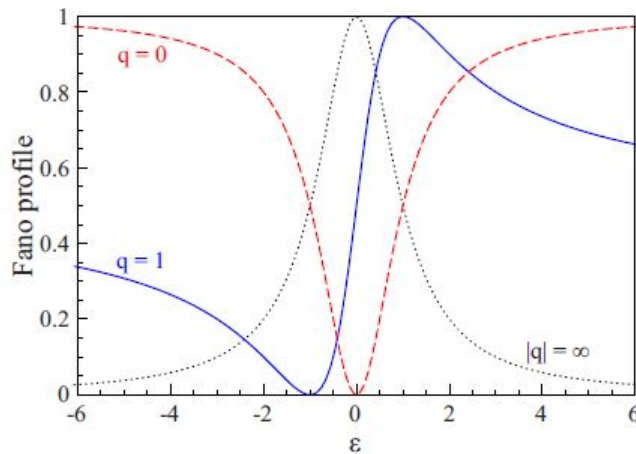


Figure 1.4 – Profils Fano normalisés avec un pré-facteur  $1/(1+q^2)$  pour différentes valeurs du paramètre asymétrique  $q$  [19]

Elle est désignée par formule de Fano et où  $\epsilon$  représente l’énergie réduite et  $q$  le paramètre asymétrique. Ce paramètre asymétrique représente le rapport des probabilités de transition d’un état mixte vers un continuum (Figure 1.4). Ainsi, lorsque  $|q| \rightarrow \infty$ , la transition vers le continuum est faible et la forme du spectre est entièrement déterminée par l’état discret qui lui confère un profil lorentzien standard. Quand  $q$  vaut l’unité, les deux états discret et continu ont

le même poids entraînant un profil asymétrique. Enfin, le cas du paramètre asymétrique nul est unique à la résonance et décrit un pic symétrique, appelé quelques fois anti-résonance.

### 1.3.2 Résonance Fano dans les cristaux photoniques

Les modes guidés dans un slab diélectrique se trouvent être confinés à l'intérieur sans pouvoir interagir avec l'environnement externe. La présence d'une structure type cristal photonique dans ce slab (présence de trous d'air par exemple) va diminuer la symétrie de translation de la structure la faisant passer d'un état continu vers des états discrets. Ainsi, on a la possibilité de générer des états discrets pouvant interagir avec le continuum.

La résonance Fano dans les cristaux photoniques est connue comme une résonance guidée de part sa capacité analogue aux modes guidés à confiner l'énergie électromagnétique dans le slab [21]. Cependant, elle se distingue des modes guidés en pouvant se coupler aux radiations externes. Donc, cette résonance offre le moyen de canaliser la lumière du slab vers l'environnement extérieur. Sur un diagramme de bande, une résonance Fano correspond à un mode de Bloch lent se trouvant en bord de la zone de Brillouin généralement ramené au point  $\Gamma$  au dessus de la droite de lumière par perturbation de symétrie pour rendre possible son excitation par une onde plane en incidence normale. Cette résonance se manifeste par un dip à profil asymétrique sur le spectre de transmission. La fréquence et la durée de vie de la résonance Fano sont fortement corrélées à la structure du CP, offrant une flexibilité dans l'exploitation des propriétés optiques dans diverses applications. En particulier, la finesse de cette résonance (facteur de qualité élevé) lui confère une grande sensibilité aux perturbations externes [22] telles que la température.

## 1.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons rappelé quelques notions de bases relatives aux cristaux photoniques. Nous avons par la suite décrit les propriétés physiques et optiques du Niobate de Lithium en mettant en évidence les effets électro-optique et pyroélectrique qui nous intéressent dans la suite de ce travail. En dernier lieu, nous avons donné un bref aperçu sur la résonance Fano qui sera exploitée, en raison de son profil très fin, pour des applications de détection de perturbations externes, notamment la température.

Le chapitre qui suit sera consacré à la présentation des outils de simulation numérique basés sur la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD).



# Chapitre 2

## Outils de modélisation numérique

### 2.1 Introduction

La complexité de la fabrication et de la caractérisation des cristaux photoniques aux fréquences optiques rend coûteuses en temps et en argent les études expérimentales systématiques sur des dispositifs à cristaux photoniques. Le développement de méthodes de modélisation numériques précises et rapides reste primordial pour l'étude de ces structures.

Les calculs théoriques liés aux cristaux photoniques reposent sur la résolution exacte des équations de Maxwell. La méthode des différences finies dans le domaine temporel, initialement proposée par K. S. Yee en 1966 [23], a été mise à profit à cet effet. Cette méthode générale permet de simuler la plupart des systèmes électromagnétiques [24].

Dans ce chapitre, nous donnons les grandes lignes de cette méthode numérique que nous avons utilisée tout au long de ce travail.

### 2.2 Principe de la FDTD

Pour étudier la propagation de la lumière et les phénomènes de résonance dans les dispositifs à cristaux photoniques, nous avons besoin de résoudre les équations de Maxwell qui représentent la base de l'électromagnétisme classique. Sous leurs formes locales, ces équations s'écrivent :

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.3)$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \quad (2.4)$$

où  $\vec{E}$  représente le vecteur champ électrique,  $\vec{D}$  le vecteur déplacement électrique,  $\vec{H}$  le vecteur champ magnétique,  $\vec{B}$  le vecteur induction magnétique et  $\vec{j}$  le vecteur densité de courant électrique. Les équations (2.1) et (2.3) sont issues de la loi de Gauss. Ainsi, l'équation (2.3) dénote l'absence de «charges magnétique» et traduit la conservation du flux du champ magnétique. L'équation (2.2) dérive de la loi de Faraday et montre qu'une variation temporelle du champ magnétique induit un champ électrique, alors que l'équation (2.4) indique que des courants électriques de conduction et/ou de déplacement induisent un champ magnétique [25].

Pour la fermeture du système d'équations de Maxwell, nous avons besoin d'intégrer les équations du milieu dites relations constitutives qui, pour un milieu linéaire, homogène et isotrope, prennent la forme :

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.5)$$

$$\vec{E} = \varepsilon \vec{D} \quad (2.6)$$

où  $\mu$  et  $\varepsilon$  sont la perméabilité magnétique et la permittivité diélectrique du milieu. Pour la plupart des matériaux étudiés et aux fréquences optiques,  $\mu = \mu_0$ .

Selon l'algorithme de Yee, les dérivées partielles dans les équations de Maxwell sont remplacées par des différences centrées. La discrétisation spatiale selon cet algorithme est tel que montré sur la figure 2.1.

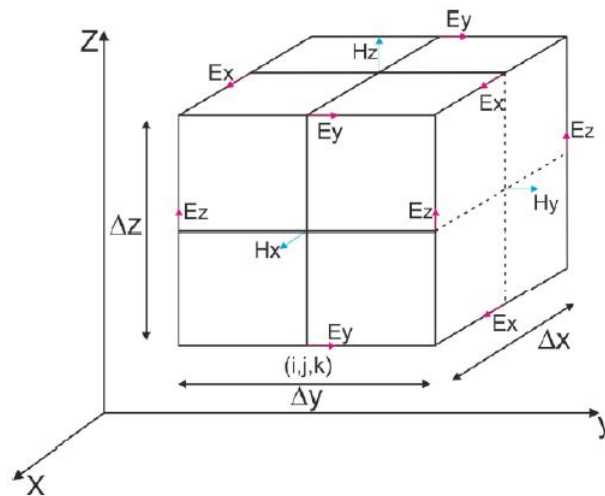


Figure 2.1 – Cellule élémentaire de Yee à 3D.

L'algorithme calcule les composantes dans le temps de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  grâce à la méthode saute-mouton (Figure 2.2) qui consiste à alterner les valeurs de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  d'un l'intervalle de  $\frac{\Delta t}{2}$ . Ainsi,

$\vec{E}$  est calculé par pas temporel de  $t=0, \Delta t, 2\Delta t\dots$  pendant que  $\vec{H}$  est calculé par pas  $t=0.5\Delta t, 1.5\Delta t, 2.5\Delta t\dots$ . Les composantes de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  sont, aussi, séparées par un demi pas spatial.

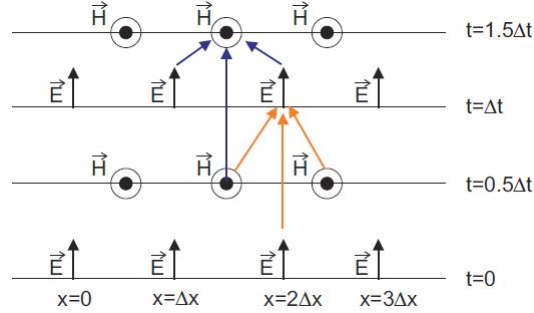


Figure 2.2 – Schéma montrant l'utilisation de la méthode des différences centrées pour les dérivations spatiales et celle de saute-mouton pour le temps.

En considérant  $U$  comme une composante quelconque du champ en un point spatial de coordonnées  $(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$  à l'instant  $t = n\Delta t$  ( $i, j, k$  et  $n$  des entiers), alors :

$$U(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = U^n(i, j, k) \quad (2.7)$$

Remplaçant les dérivées explicites tirées des équations (2.2) à (2.4) par les différences finies centrées correspondantes et en étant restreint à un matériau non dispersif, on obtient les expressions du champ électromagnétique dans le code FDTD suivantes :

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = E_x^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left( \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \right)$$

$$E_y^{n+1}(i, j, k) = E_y^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left( \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right)$$

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = E_z^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left( \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right)$$

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left( \frac{E_y^n(i, j, k + \frac{1}{2}) - E_y^n(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j + \frac{1}{2}, k) - E_z^n(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_y^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left( \frac{E_z^n(i + \frac{1}{2}, j, k) - E_z^n(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i, j, k + \frac{1}{2}) - E_x^n(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \right)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left( \frac{E_x^n(i, j + \frac{1}{2}, k) - E_x^n(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i + \frac{1}{2}, j, k) - E_y^n(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right)$$

## 2.3 Stabilité et dispersion numériques

La discrétisation spatiale entraîne l'apparition d'une dispersion non-physique des signaux qui se propagent dans la fenêtre de calcul. Pour y remédier, cette discrétisation doit être suffisamment petite pour échantillonner la longueur d'onde  $\lambda$  des signaux avec un nombre suffisant de points. Ainsi le pas spatial doit satisfaire au moins le critère suivant :

$$\max(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{min}}{20} \quad (2.8)$$

Le maillage spatial non-uniforme est un moyen qui permet de tenir compte de manière précise des géométries incurvées ou encore irrégulières à l'interface des différents matériaux. Ainsi, on utilise un maillage fin dans les régions où les effets d'interface sont importants et un maillage plus large dans le volume où le matériau est homogène et sans effet d'interface. Dans ce travail, on adopte un maillage non-uniforme où le pas maximum est inférieure à  $\frac{\lambda_{min}}{60}$ .

D'autre part, et pour assurer une stabilité numérique nécessaire à l'obtention de résultats convergents, le critère de stabilité suivant doit être vérifié :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.9)$$

où  $v_{max}$  est la vitesse maximum de propagation dans le milieu étudié. En général c'est la vitesse de la lumière dans le vide.

## 2.4 Conditions aux limites

Les conditions aux limites constituent un point très important dans cette méthode. Il est possible d'utiliser à la fois des conditions périodiques et des conditions absorbantes sur une même structure. Ceci est intéressant, par exemple, pour la simulation d'un guide à cristal photonique. Parmi les conditions d'absorption aux limites, la plus utilisée est celle de type PML de Bérenger (Perfectly Matched Layer) [26]. Cette dernière, basée sur le placement d'un absorbant artificiel sur le bord de la cellule, est définie pour avoir une adaptation d'impédance à l'interface de deux milieux de même indice qui satisfait :

$$\frac{\sigma^m}{\mu} = \frac{\sigma^e}{\varepsilon} \quad (2.10)$$

où  $\sigma^m$  et  $\sigma^e$  sont, respectivement, les conductivités magnétique et électrique des couches PML.

Elle est définie, aussi, pour éviter toute réflexion de l'onde électromagnétique sur l'objet qui fausserait les simulations.

Les conditions aux limites périodiques (CLP) ont aussi leur importance pour leur application aux structures périodiques. Ces conditions sont adaptées de façon à se limiter uniquement à la maille élémentaire de la structure qui sera répétée à l'infini dans la direction des CLP.

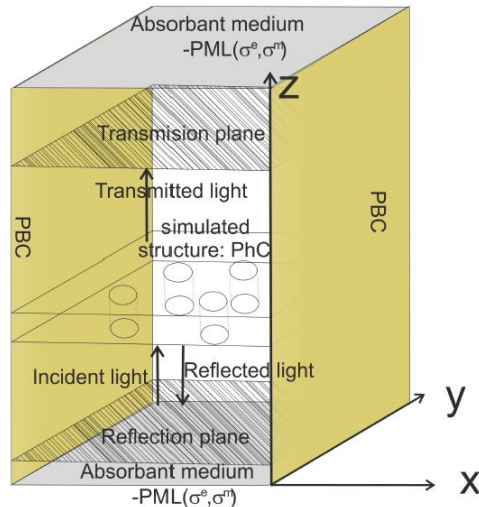


Figure 2.3 – Position des conditions PML et périodiques (PBC) dans les calculs FDTD [27].

## 2.5 Conclusion

La méthode FDTD est une technique de modélisation numérique très robuste et parfaitement adaptée aussi bien aux structures périodiques qu'apériodiques. Il est également possible de lui intégrer la nature dispersif des milieux considérés en faisant appel aux modèles analytiques de dispersion et en ayant recours à certaines techniques telles que la méthode ADE pour leur implémentation. Elle permet en outre de prédire la réponse spectrale des système étudiés en terme de spectres de transmission et de réflexion, de calculer les distributions des champs électromagnétiques ou encore d'effectuer des calculs de structures de bandes photoniques.

La nature explicite de la méthode FDTD impose des restrictions sur le choix des pas de discrétisation spatiale ou temporelle, ce qui engendre, surtout pour les études 3D, des temps de calcul très longs et une occupation importante de l'espace mémoire. Néanmoins, lorsque les structures étudiées présentent une invariance selon une direction spatiale donnée, il est possible de simplifier les codes de calcul en traitant séparément les deux polarisations TE et TM (en annulant les dérivées par rapport à la direction d'invariance). Ceci permet d'étudier des structures 3D avec des codes de calcul 2D.

# Chapitre 3

## Étude de la sensibilité à la température de la résonance Fano dans les structures métallo-diélectriques

Ce chapitre est consacré à l'étude de la sensibilité à la température des structures métallo-diélectriques périodiques 1D qui se reflète à travers le décalage de la longueur d'onde de résonance Fano. L'excitation de ces résonances dans ce type de structure est rendu possible par l'approche double période. L'effet de la température est pris en compte dans le modèle de dispersion de Sellmeier et également dans les propriétés optique et électrique intrinsèques du Niobate de Lithium.

### 3.1 Prise en compte simultanée des modèles de dispersion de Sellmeier et de Drude à deux points critiques dans le code $2D - FDTD$

Le modèle de Sellmeier décrit la dispersion sans absorption du LN, par l'intermédiaire de son indice de réfraction, dans une large gamme de longueurs d'onde dans laquelle ce matériau est transparent.

La littérature offre une panoplie de formulation de l'équation de Sellmeier. En effet, des améliorations à l'équation initiale ont été apportées pour élargir le domaine valide de longueurs d'onde, ou encore pour rendre compte de la dépendance en température de l'indice de réfraction. Pour nos simulations, on a eu recours à l'expression formulée par Jundt [28] pour le Niobate de Lithium congruent, qui est fonction de la longueur d'onde et de la température. Cet indice de

réfraction s'écrit comme suit :

$$n_e^2 = a_1 + b_1 f + \frac{a_2 + b_2 f}{\lambda^2 - (a_3 + b_3 f)^2} + \frac{a_4 + b_4 f}{\lambda^2 - a_5^2} - a_6 \lambda^2 \quad (3.1)$$

où  $a_i$  et  $b_i$  sont les coefficients de Sellmeier, obtenus par ajustement aux valeurs expérimentales.  $\lambda$  la longueur d'onde exprimée en micromètre et  $f$  le paramètre de température dont l'expression, pour des températures exprimées en  $^{\circ}C$ , est :

$$f = (T - 24.5)(T + 570.82) \quad (3.2)$$

La dispersion du  $LiNbO_3$  pour différentes températures tracée avec la formule (3.1) est telle que montrée sur la figure 3.1. On remarque que la variation de l'indice  $n_e$  en fonction de la longueur d'onde est décroissante indiquant une dispersion dite anormale. Nous constatons également, sur cette figure, que la variation de  $n_e$  en fonction de la température est très faible et est de l'ordre de  $10^{-4}$ .

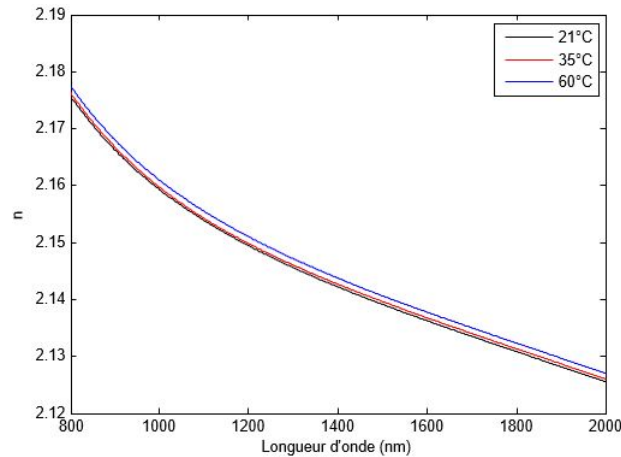


Figure 3.1 – Variations de l'indice de réfraction du  $LiNbO_3$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de température

Les structures étudiées sont constituées d'un réseau de piliers métalliques faits en argent déposé sur du  $LiNbO_3$ , et pour tenir compte de la dispersion de l'argent dans la gamme optique et celle du Niobate de Lithium, nous avons intégré dans notre code de calcul le modèle de Drude à 2 points critiques ( $D2PC$ ) (voir la thèse de Doctorat de M. Hamidi [29] pour plus de détails) et le modèle de Sellmeier. L'implémentation de ces deux modèles analytiques de dispersion dans le code  $2D - FDTD$  s'est faite à l'aide de la méthode  $ADE$  (Auxiliary Differential Equation).

## 3.2 Tests de validation

Les structures considérées sont éclairées en incidence normale (selon  $z$ ) avec une onde électromagnétique polarisée transverse magnétique (TM). Comme ces structures sont invariantes selon la direction  $y$ , la fenêtre de calcul se trouve dans le plan ( $xz$ ) avec un pas spatial fixe selon  $x$  et vaut  $\Delta x = 2nm$ , et non-uniforme le long de l'axe  $z$  pour une meilleure description de nos structures tout en optimisant les temps de calcul et la gestion de l'espace mémoire.

### — Cas d'une bi-couche en Argent et en Niobate de Lithium

Nous avons effectué un calcul analytique de transmission et un autre par le code  $2D - FDTD$  à travers une bicouche d'Argent et de LN d'épaisseur  $50nm$  et  $100nm$ , respectivement, plongée dans l'air (Figure 3.2.b). Les courbes de transmission normalisée en fonction de la longueur d'onde sont représentées sur la figure 3.2.a

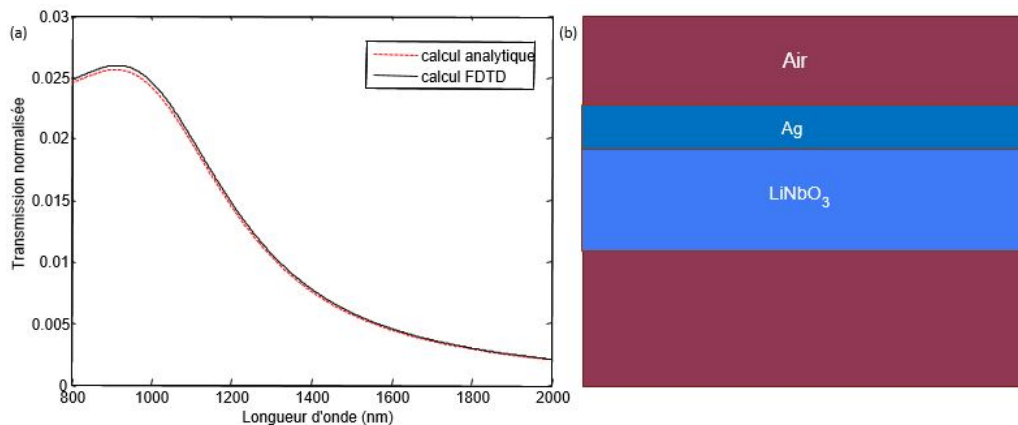


Figure 3.2 – (a) Spectre de transmission normalisée. (b) Structure composée d'une bicouche plongée dans l'air.

### — Cas d'un réseau 1D en argent déposé sur du Niobate de Lithium

Considérons maintenant une structure diffractante (figure 3.3) composée de piliers en Ag de hauteur  $250nm$  et de largeur  $50nm$  disposés selon un réseau périodique dont le pas est fixé à  $210nm$ . Ce réseau est déposé sur une couche de LN de  $1000nm$  d'épaisseur et le tout est supporté par un substrat en verre (voir figure 3.3).

Sur la figure 3.4, nous avons représenté en trait continu le calcul de transmission obtenu avec le code  $2D - FDTD$  intégrant les deux modèles de dispersion adoptés et avec des symboles les valeurs obtenues par un calcul toujours FDTD mais monochromatique dans lequel les valeurs des indices de réfraction sont insérées pour chaque longueur d'onde à partir de tables pré-établies. Il est à noter que les valeurs relatives au Niobate de Lithium sont obtenues pour une température de  $21^{\circ}C$ .



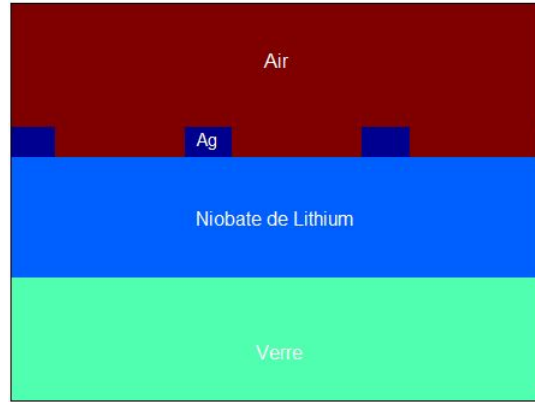


Figure 3.3 – Structure diffractante composée d'un CP 1D périodique déposé sur une couche de LN, elle-même supportée par un substrat en verre

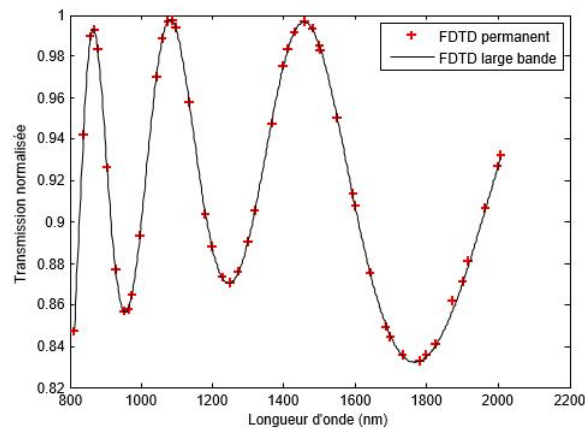


Figure 3.4 – Transmissions normalisées à travers la structure diffractante de la figure 3.3.

Les résultats des deux tests effectués montrent une concordance quasi parfaite des résultats obtenus avec le code  $2D - FDTD$ , intégrant les modèles de dispersion de Sellmeier et de Drude à deux points critiques, avec les résultats analytiques et ceux obtenus avec le calcul FDTD permanent sans dispersion. Ceci constitue une validation du code utilisé, et nous permet de l'adopter pour la modélisation et la simulation de structures dédiées aux applications de détection.

### 3.3 Étude de structures dédiées à la détection de température

Pour l'étude de structures dédiées aux applications de détections de température, il est judicieux d'exploiter la résonance de Fano en raison de son profil très fin qui lui confère un facteur de qualité très élevé la rendant ainsi très sensible aux perturbations externes. De plus et pour être exploitable, cette résonance doit interagir avec une onde plane éclairant la structure

en incidence normale. Ceci se traduit sur un diagramme de bandes photoniques par la présence de modes propres au point de haute symétrie  $\Gamma$  du réseau réciproque.

### 3.3.1 Excitation de la résonance Fano

La première structure étudiée est composée de bâtonnets d'Argent, de hauteur  $350\text{nm}$  et de largeur  $60\text{nm}$  disposés régulièrement selon une période de  $210\text{nm}$ , sur une couche de  $\text{LiNbO}_3$  de hauteur  $1200\text{nm}$  (Figure 3.5.a). Nous avons effectué un calcul de modes propres de cette structure au point  $\Gamma$ . On remarque sur la figure 3.5.c la présence de deux modes propres. Cependant, ils n'ont pu être excités, comme le confirme les spectres de transmission et réflexion relatifs à cette structure qui n'exhibent aucune variation significative au niveau des fréquences associées à ces modes (voir 3.6.a).

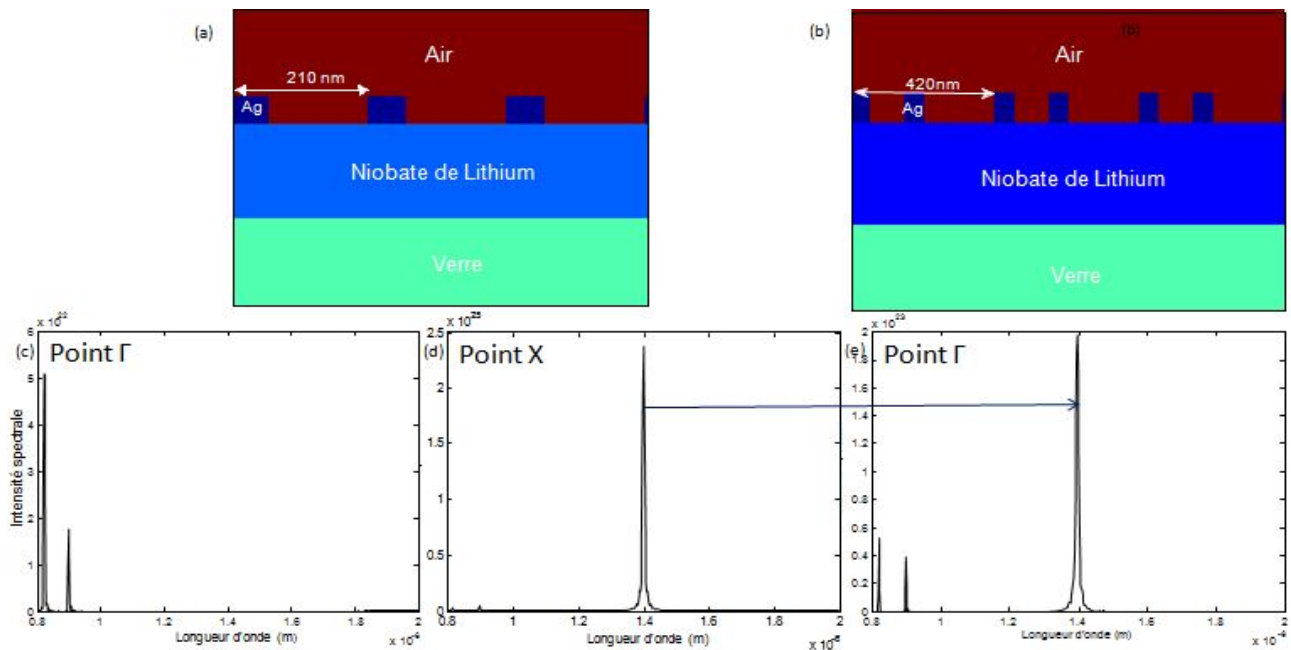


Figure 3.5 – (a) et (b) structure à CP 1D de période  $a$  et  $2a$ , respectivement, sur un substrat en  $\text{LiNbO}_3$ . (c) Calcul de mode propre au point  $\Gamma$  et (d) au point  $X$  de la structure (a) révélant un mode à  $1400\text{nm}$  qui se retrouve, en doublant la période, au point  $\Gamma$  de la structure (b).

Un autre calcul de modes propres, effectué cette fois-ci au point  $X$  (3.5.d), indique la présence d'un mode propre à la fréquence  $1400\text{nm}$ . C'est un mode non radiatif, situé sous la ligne de lumière, qui ne peut être excité par une onde propagative. Toutefois, l'approche double période permet de le ramener vers le point  $\Gamma$ .

Cette technique qui consiste à perturber un motif sur deux de la structure diffractante, soit par déplacement ou changement de forme ou de nature, permet d'effectuer un repliement de

bande qui va ramener les modes de Bloch du point  $X$  et notamment ceux à faible vitesse de groupe, appelés modes lents, et situés en dessous de la droite de lumière, vers le point  $\Gamma$ .

Notre structure initiale a été perturbée par un décalage d'un bâtonnet sur deux d'un pas de 50nm. La nouvelle structure obtenue est représenté sur la figure 3.5.b.

Les calculs de modes propres de cette nouvelle structure au point  $\Gamma$ , illustrés sur la figure 3.5.e, confirme le repliement de bande avec la présence d'un pic à 1400nm. Les spectres de transmission et de réflexion normalisés, représentés sur la figure 3.6.b, exhibent cette fois des discontinuités à profil asymétrique à 1400nm typique des résonances de Fano, indiquant un couplage entre l'onde incidente et le mode de Bloch du réseau excité.

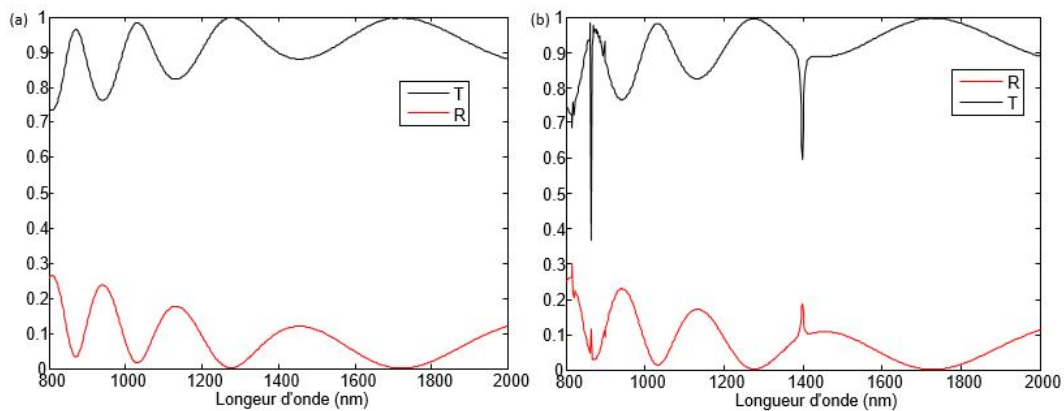


Figure 3.6 – Transmission et réflexion normalisée : (a) de la structure de période  $a$  et (b) de la structure de période  $2a$ .

### 3.3.2 Analyse de la sensibilité à la température des structures modélisées par le modèle de Sellmeier

Après avoir excité la résonance Fano des structures modélisées et localisé sa fréquence, nous allons dans cette section analyser l'effet de la température extérieure sur cette résonance en terme de décalage (shift) de sa fréquence.

La réponse diélectrique du LN, engendrée par la variation de sa température, est prise en compte dans le modèle de Sellmeier. Les spectres de transmission et de réflexion obtenus à deux températures différentes ( $30^{\circ}C$  et  $60^{\circ}C$ ) sont illustrés sur la figure 3.7. On constate que la résonance de Fano ne se trouve aucunement perturbée du fait la faible variation de l'indice de réfraction de Sellmeier.

Ce résultat nous autorise à faire le constat que le modèle de Sellmeier ne permet pas de traduire fidèlement la variation significative de l'indice de réfraction engendrée par l'évolution de la température du LN en présence d'un confinement de la lumière. Cette variation doit

donc être exprimée en exploitant les propriétés intrinsèques de ce matériau que sont les effets pyroélectrique et électro-optique linéaire.

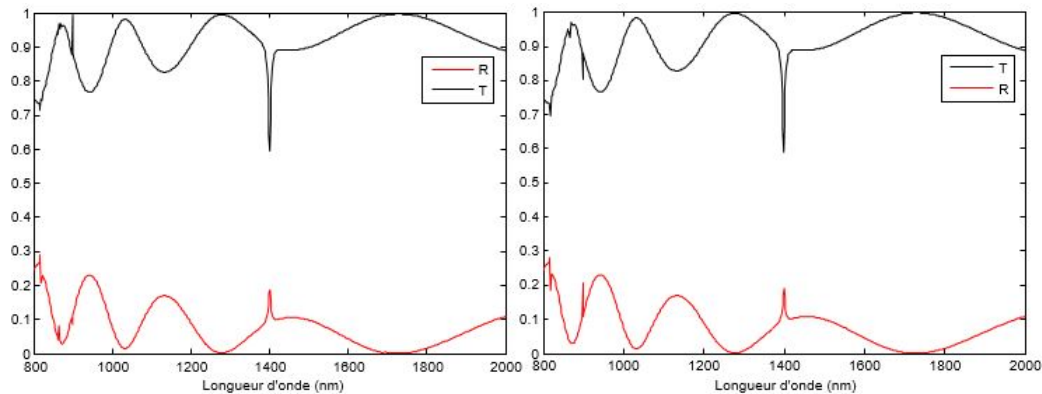


Figure 3.7 – Transmission et réflexion normalisées . À gauche, pour une température de 30 °C et à droite pour une température de 60 °C.

### 3.4 Analyse de la sensibilité de détection en exploitant les propriétés intrinsèques du $LiNbO_3$

Pour rendre l'effet de ces propriétés intrinsèques significatif, il est primordial d'assurer un confinement du champ dans le LN. La cartographie de la distribution de l'intensité électrique (figure 3.8), obtenue par le code  $2D - FDTD$ , adapté au calcul monochromatique à la longueur d'onde de résonance  $1400nm$ , montre que le mode Fano excité est un mode d'air où la lumière reste confinée dans le petit espace d'air compris entre les piliers d'Argent.

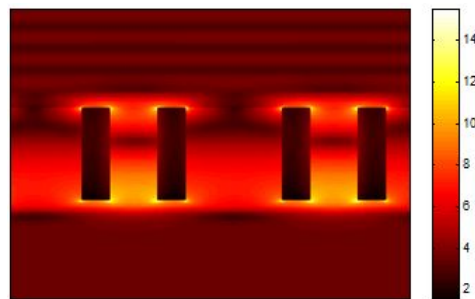


Figure 3.8 – Distribution de l'intensité du champ électrique à  $\lambda = 1400nm$ .

Pour optimiser la sensibilité du Niobate de Lithium à la détection de température, il faudrait s'assurer d'un bon confinement de la lumière dans celui-ci. Ceci nous a orienté vers un autre choix de structure qui consiste en un cristal photonique périodique 1D de bâtonnets en Argent incrustés dans un substrat de  $LiNbO_3$ .

### 3.4.1 Calcul de bandes photoniques

Pour localiser la résonance de Fano, nous avons effectué un calcul de bandes sur une structure non perturbée et un autre sur une structures perturbée (avec l'approche double période). Les paramètres des structures étudiées sont : des bâtonnets en Argent de hauteur  $350nm$  et de largeur  $60nm$ , une période de  $210nm$  pour la structure non perturbée (voir figure 3.9.a et b). Les diagrammes de bandes obtenus montrent la présence d'un mode à la longueur d'onde de  $1088nm$ , initialement présent au point X au dessous de la droite de lumière et qui a été ramené vers le point  $\Gamma$  comme le montre les figures 3.9c et d. Le spectre de transmission associé à la structure non perturbée ne montre aucune discontinuité (Figure 3.10.a) alors que celui associé à la structure perturbée, représenté sur la figure 3.10.b, indique une résonance de type Fano à la longueur d'onde  $1088nm$  qui correspond la longueur d'onde du mode entouré en bleu sur le diagramme de bande de la structure perturbée.

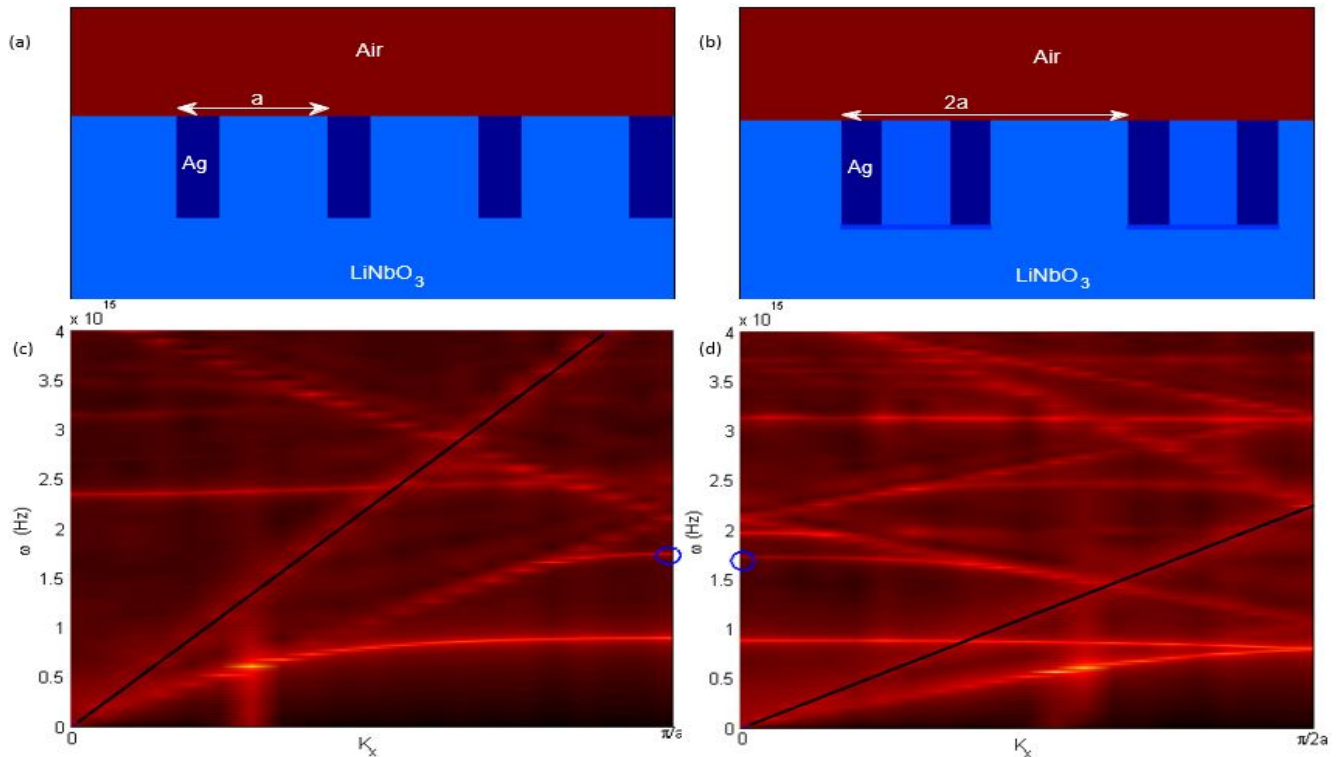


Figure 3.9 – Structures modélisées et leurs diagrammes de bande respectifs : (a) structure non perturbée et son diagramme de bande  $\omega(k)$  en (c). (b) structure perturbée 1D et son diagramme de bande en (d).

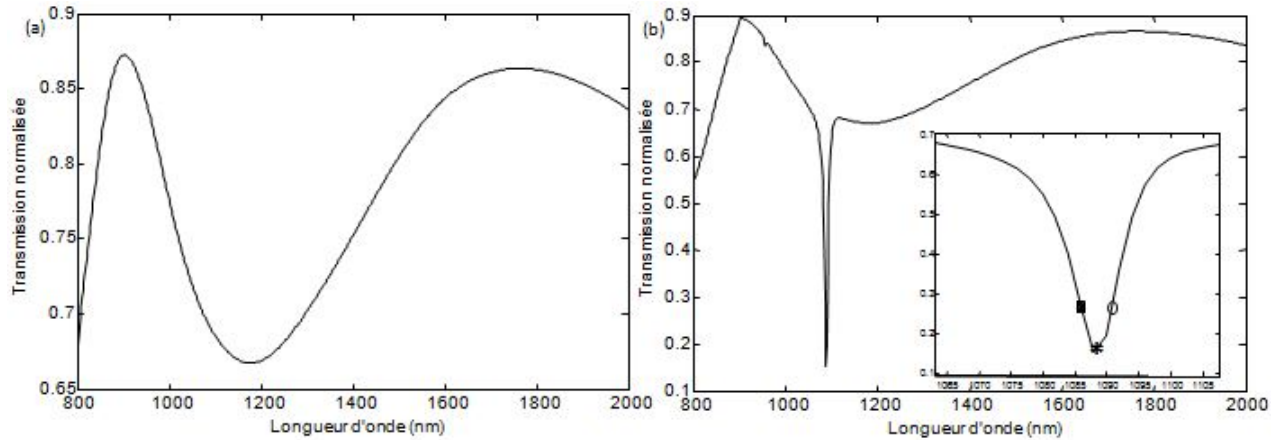


Figure 3.10 – Spectre de transmission en fonction de la longueur d’onde de : (a) la structure non-perturbée et (b) la structure perturbée.

### 3.4.2 Cartographies du champ électrique

Le calcul de la distribution de l’amplitude du champ électrique au pic de résonance effectué par un calcul FDTD continu à  $\lambda = 1088nm$ , illustré sur la figure 3.11.a, montre un mode diélectrique où la lumière est confiné dans le Niobate de Lithium et de manière plus intense dans le plus petit espace entre les bâtonnets, ce qui est favorable à l’exploitation de l’effet électro-optique.

La distribution spatiale du vecteur de Poynting à la résonance montre un fort couplage de la lumière entre les cavités constituant le motif de la structure. à la longueur d’onde située juste à droite du minimum de la résonance, on peut voir sur la figure 3.11.b que la cavité constitue un circulateur pour les photons. Le flux d’énergie entre par le bas de la grande cavité et revient en passant par la petite. Pour une longueur d’onde située à gauche du minimum, la circulation est inversée. Par contre au minimum de transmission (Figure 3.11.a), la présence des deux contre-propagations se compensent en annulant la circulation de la lumière autour du métal. Ces résultats sont similaires à ceux obtenus dans la référence [30].

### 3.4.3 Étude de la sensibilité de la résonance Fano à la température

La sensibilité à la température apparait à travers la variation de l’indice de réfraction du LN. En considérant cette variation comme résultant du champ électrique interne engendré par l’effet pyroélectrique, la variation de l’indice de réfraction est alors donnée par l’équation suivante [31] :

$$\Delta n = -\frac{1}{2}n_e^3 f_{opt}^2 r_{33} E_z \quad , \text{ avec } : E_z = -\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} P \Delta T \quad (3.3)$$



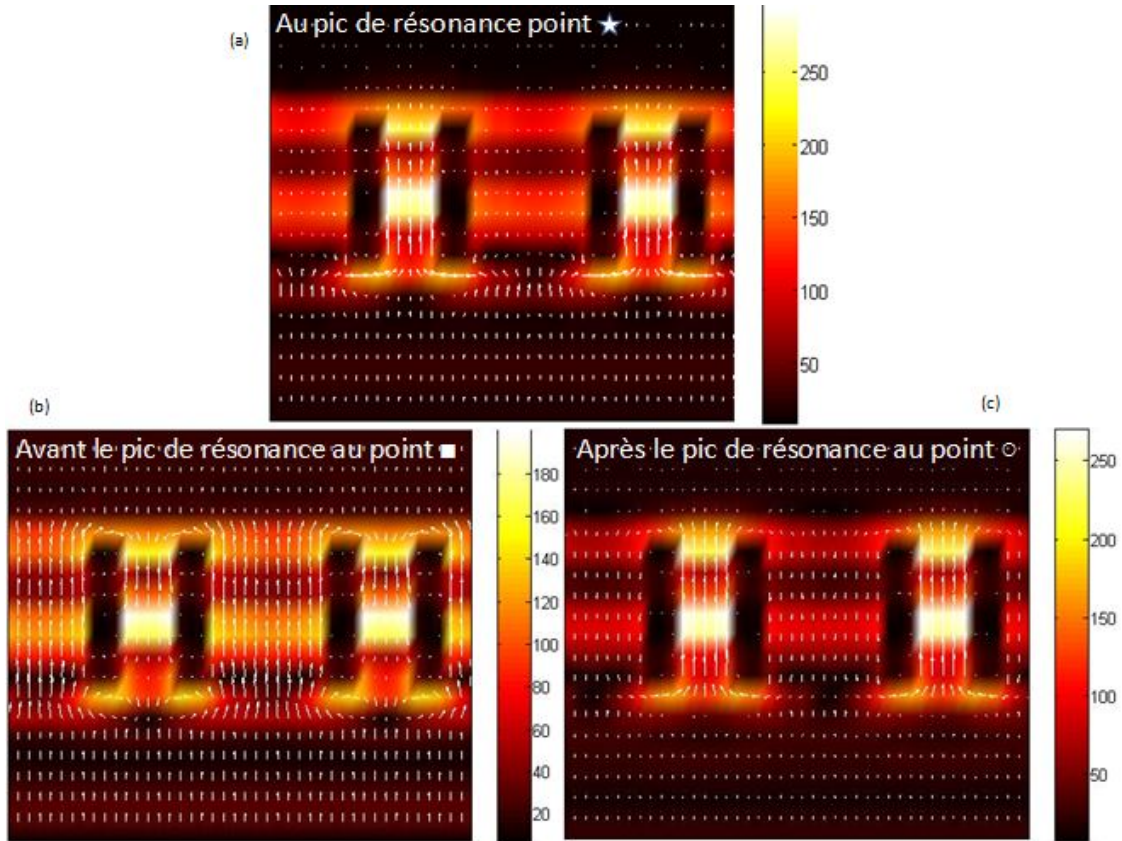


Figure 3.11 – Cartographie de distribution d’amplitude du champ électrique (fond coloré) et distribution spatiale du vecteur de Poynting (flèches blanches) : (a) au pic de résonance  $\lambda = 1088nm$ , (b) à longueur d’onde juste avant la résonance  $\lambda = 1084nm$  et (c) à la longueur d’onde juste après la résonance  $\lambda = 1092nm$ .

Où  $n_e = 2.14$  est l’indice de réfraction extraordinaire du LN,  $r_{33} = 32^{pm/v}$  le coefficient électro-optique du LN,  $E_z$  le champ électrique généré par l’effet pyroélectrique dépendant de la variation de la température et  $f_{opt}$  le facteur optique qui quantifie le confinement de la lumière, évalué à partir du rapport des intégrales de l’amplitude du champ électrique sur toute la surface de la structure incluant le cristal photonique sur celle évalués sur la même surface en l’absence des piliers en Argent. Ce facteur optique est évalué comme suit [32] :

$$f_{opt} = \frac{\iint_{CP} |E(x, z)| dx dz}{\iint_{bulk} |E(x, z)| dx dz} \quad (3.4)$$

où  $\varepsilon_0$  est la permittivité du vide,  $\varepsilon_r = 28.7$  la permittivité relative du LN et  $P = 6 \cdot 10^{-5} Cm^{-2}K^{-1}$  le coefficient pyroélectrique.

Le facteur  $f_{opt}$  est calculé grâce à deux codes FDTD permanents : le premier est dédié au cristal photonique en Argent et le second à la structure constituée uniquement de Niobate de Lithium massif sans CP. La structure est éclairée en incidence normale par un faisceau

monochromatique à la longueur d'onde de résonance  $1088\text{nm}$  et à la température  $T = 21^\circ\text{C}$ . On obtient trois valeurs locales différentes de  $f_{opt}$  correspondantes aux différentes localisations du confinement dans le LN. Ainsi, on a  $f_{opt} = 7.82$  pour la petite cavité,  $f_{opt} = 3.92$  pour la grande cavité et  $f_{opt} = 13.78$  pour le bas des bâtonnets d'Argent.

Par la suite, nous avons effectué des simulations FDTD large bande pour observer l'effet de la température sur notre structure en modifiant la valeur de l'indice de réfraction du LN, pour les trois localisations citées, à l'aide de l'équation 3.3 en substituant les valeurs de  $\Delta T$ . La figure 3.12 montre les spectres de transmission pour différentes valeurs de température résultant des simulations. Le tableau 3.1 résume les valeurs de longueurs d'onde de résonance  $\lambda_{res}$ , leur décalage et la sensibilité obtenue  $\Delta\lambda/\Delta T$ . Sur la figure 3.12.b, nous avons représenté la variation de la longueur d'onde de résonance en fonction de la température. à partir de la pente de ce graphe, nous avons estimé une sensibilité moyenne de  $0.76\text{nm}/^\circ\text{C}$ .

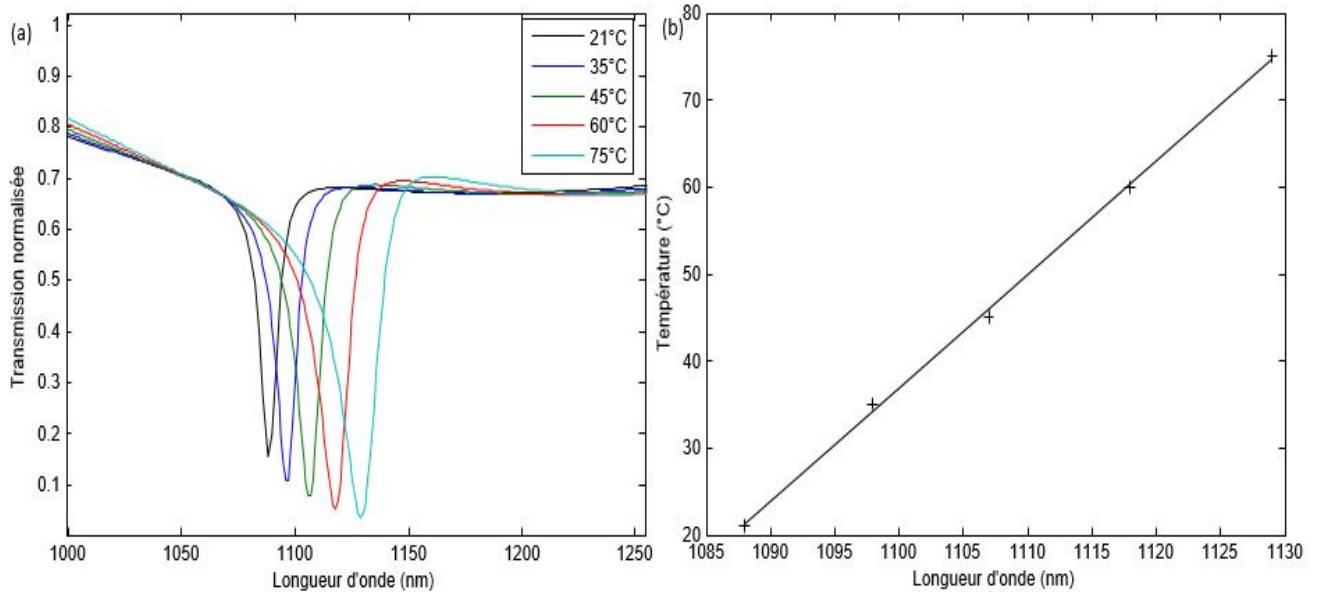


Figure 3.12 – a) Spectres de transmission normalisée pour différentes valeurs de température. b) variation de la longueur d'onde de résonance en fonction de la température.

$T(^{\circ}\text{C})$	21	35	45	60	75
$\lambda_{res}(\text{nm})$	1088	1098	1107	1118	1129
$\Delta\lambda_{res}(\text{nm})$		10	19	30	41
$\Delta T(^{\circ}\text{C})$		14	24	39	54
$\Delta\lambda_{res}/\Delta T(\text{nm}/^{\circ}\text{C})$		0.71	0.79	0.77	0.76

Tableau 3.1 – Longueurs d'onde de résonance et leurs shifts à différentes températures



### 3.5 Conclusion

La première étude, menée grâce à la modélisation par des simulations FDTD, a montré que bien que le modèle de Sellmeier exhibe une dépendance en température, les variations d'indice engendrées se trouvent n'être pas assez conséquentes pour induire une quelconque sensibilité qui puisse se traduire à travers un décalage de longueur d'onde de résonance Fano. Par contre, lors de l'investigation de la sensibilité à la température d'une seconde structure, en faisant appel aux propriétés électro-optiques du  $LINbO_3$ , on a pu observer un décalage de  $\lambda_{res}$ . En effet, ce shift en longueur d'onde est surtout dû à l'effet pyroélectrique du Niobate de Lithium : un changement de température de  $\Delta T$  induit un champ électrique, généré par l'effet pyroélectrique, donnant lieu à la variation de l'indice de réfraction qui, exaltée par le confinement du champ électro-optique, entraîne un décalage de la position de la résonance Fano. Ainsi, on a obtenu une sensibilité à la température moyenne de  $0.76nm/^\circ C$ .

# Conclusion générale

Les cristaux photoniques, structures artificielles permettant le contrôle de la propagation et le confinement de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde, offrent une large gamme d'applications dans des domaines divers et variés tout en participant à la bonification de notre quotidien. Dans ce travail, on s'est intéressé plus précisément à la détection de température.

Pour ce faire, nous avons exploité les résonances de Fano, caractérisées par un profil très fin, excitées dans un cristal photonique en faisant appel à l'approche double période. La première structure considérée est composée d'un cristal photonique déposé sur un substrat en Niobate de Lithium que nous avons modélisée en utilisant un code  $2D - FDTD$  qui tient compte de la dispersion de l'Argent décrite par le modèle de Drude à deux points critiques et de la dispersion du  $LiNbO_3$  donnée par l'équation de Sellmeier. Cette dernière exhibe une dépendance à la température que nous avons essayé d'exploiter pour obtenir une sensibilité de la résonance Fano en modifiant la valeur de la température. Cependant, la variation d'indice engendrée par un changement de température dans l'équation de Sellmeier reste assez faible pour entraîner un quelconque décalage de longueur d'onde de résonance.

La seconde structure considérée ressemble à la première mais, par soucis d'avoir un confinement de l'énergie électromagnétique dans le Niobate de Lithium afin de tirer profit de ses propriétés intrinsèques (effets électro-optique et pyroélectrique), les motifs d'Argent sont incrustés dans le Niobate de Lithium. Les simulations numériques menées, en exploitant ces propriétés, ont permis d'obtenir une sensibilité moyenne de  $0.76nm/^\circ C$ .

En perspective, nous envisageons d'optimiser cette structure de façon à obtenir un meilleur confinement tout en minimisant les pertes métalliques soit par un confinement localisé essentiellement dans le LN ou soit par remplacement de l'argent par un autre métal moins absorbant.

# Bibliographie

- [1] Eli Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Physical review letters*, 58(20) :2059, 1987.
- [2] A GRAZIA MIGNANI and Francesco Baldini. Fiber optic sensors in health care. In *SPIE proceedings series*, pages 454–462. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 1997.
- [3] Wentao Qiu, Abdoulaye Ndao, Venancio Calero Vila, Roland Salut, Nadège Courjal, Fadi Issam Baida, and Maria-Pilar Bernal. Fano resonance-based highly sensitive, compact temperature sensor on thin film lithium niobate. *Optics letters*, 41(6) :1106–1109, 2016.
- [4] Jean-Michel Lourtioz and Henri Benisty. *Les cristaux photoniques ou la lumière en cage*. Hermes-Science, 2003.
- [5] Robert-Philip Isabelle, Beveratos Alexios, and Sagnes Isabelle. Moduler rapidement la lumière dans les lasers à cristaux photoniques. <http://www.lpn.cnrs.fr/fr/GOSS/FaitsMarquants/PageFaitsMarquantsType.php>.
- [6] Oscar Painter, J Vučković, and Axel Scherer. Defect modes of a two-dimensional photonic crystal in an optically thin dielectric slab. *JOSA B*, 16(2) :275–285, 1999.
- [7] Marin Soljačić, Steven G Johnson, Shanhui Fan, Mihai Ibanescu, Erich Ippen, and JD Joannopoulos. Photonic-crystal slow-light enhancement of nonlinear phase sensitivity. *JOSA B*, 19(9) :2052–2059, 2002.
- [8] Ed L Wooten, Karl M Kissa, Alfredo Yi-Yan, Edmond J Murphy, Donald A Lafaw, Peter F Hallemeier, David Maack, Daniel V Attanasio, Daniel J Fritz, Gregory J McBrien, et al. A review of lithium niobate modulators for fiber-optic communications systems. *IEEE Journal of selected topics in Quantum Electronics*, 6(1) :69–82, 2000.
- [9] Huihui Lu, Fadi Issam Baida, Gwenn Ulliac, Nadège Courjal, Manuel Collet, and Maria-Pilar Bernal. Lithium niobate photonic crystal wire cavity : Realization of a compact electro-optically tunable filter. *Applied Physics Letters*, 101(15) :151117, 2012.

- [10] Jean Dahdah, Nadège Courjal, and Fadi Issam Baida. Lithium niobate photonic crystal cavity for chemical detection. In *Proceedings of the 4th Optical, Optoelectronic and Photonic Material and Application (ICOOPMA)*, page 62, 2010.
- [11] Luis Arizmendi. Photonic applications of lithium niobate crystals. *physica status solidi (a)*, 201(2) :253–283, 2004.
- [12] Albert A Ballman. Growth of piezoelectric and ferroelectric materials by the czochraiski technique. *Journal of the American Ceramic Society*, 48(2) :112–113, 1965.
- [13] Wikipedia. Lithium niobate — wikipedia, the free encyclopedia.
- [14] Uwe Schlarb and Klaus Betzler. Refractive indices of lithium niobate as a function of temperature, wavelength, and composition : A generalized fit. *Physical Review B*, 48(21) :15613, 1993.
- [15] Michel Aillerie. *Etude comparée des méthodes de mesure des coefficients électro-optique : application à LiNbO3*. PhD thesis, Metz, 1991.
- [16] GE Peterson, AA Ballman, PV Lenzo, and PM Bridenbaugh. Electro-optic properties of linbo3. *Applied Physics Letters*, 5(3) :62–64, 1964.
- [17] Jassem Safioui. *Nouvelle technique de photo-inscription dans LiNbO3 : autofocalisation contrôlée par effet pyroélectrique*. PhD thesis, Université de Franche-Comté, 2010.
- [18] Weidong Zhou, Deyin Zhao, Yi-Chen Shuai, Hongjun Yang, Santhad Chuwongin, Arvinder Chadha, Jung-Hun Seo, Ken X Wang, Victor Liu, Zhenqiang Ma, et al. Progress in 2d photonic crystal fano resonance photonics. *Progress in Quantum Electronics*, 38(1) :1–74, 2014.
- [19] Andrey E Miroshnichenko, Sergej Flach, and Yuri S Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Reviews of Modern Physics*, 82(3) :2257, 2010.
- [20] Ugo Fano. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Physical Review*, 124(6) :1866, 1961.
- [21] Shanhui Fan and JD Joannopoulos. Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs. *Physical Review B*, 65(23) :235112, 2002.
- [22] Zhiquan Chen, Hongjian Li, Shiping Zhan, Zhihui He, Boxun Li, and Hui Xu. Sensing characteristics based on fano resonance in rectangular ring waveguide. *Optics Communications*, 356 :373–377, 2015.
- [23] Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 14(3) :302–307, 1966.
- [24] Allen Taflove and Susan C Hagness. *Computational electrodynamics*. Artech house, 2005.

- [25] Max Born and Emil Wolf. *Principles of optics : electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013.
- [26] Jean-Pierre Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of computational physics*, 114(2) :185–200, 1994.
- [27] Wentao Qiu. *Study of photonic crystals on thin film lithium niobate for sensing applications : design, fabrication and characterization*. PhD thesis, jun 2016.
- [28] Dieter H Jundt. Temperature-dependent sellmeier equation for the index of refraction,  $n_e$ , in congruent lithium niobate. *Optics Letters*, 22(20) :1553–1555, 1997.
- [29] M Hamidi, FI Baida, A Belkhir, and O Lamrous. Implementation of the critical points model in a sfm-fdtd code working in oblique incidence. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 44(24) :245101, 2011.
- [30] Amarachukwu Enemuo, Martin Nolan, Young Uk Jung, Andrii B Golovin, and David T Crouse. Extraordinary light circulation and concentration of s-and p-polarized phase resonances. *Journal of Applied Physics*, 113(1) :014907, 2013.
- [31] Huihui Lu, Benattou Sadani, Gwenn Ulliac, Clement Guyot, Nadège Courjal, Manuel Collet, Fadi Issam Baida, and Maria-Pilar Bernal. Integrated temperature sensor based on an enhanced pyroelectric photonic crystal. *Optics express*, 21(14) :16311–16318, 2013.
- [32] Wentao Qiu, Huihui Lu, Fadi Issam Baida, and Maria-Pilar Bernal. Ultra-compact on-chip slot bragg grating structure for small electric field detection. *Photonics Research*, 5(3) :212–218, 2017.