



UNIVERSITE MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE



## Mémoire de Master

SPECIALITE PHYSIQUE

*Option :*

*Physique de l'Interaction Rayonnement Matière*

**Thème :**

---

# Étude des résonances Fano dans les structures périodiques métallo-diélectriques

---

Proposé et dirigé par :

**Mr. Abdelaziz MEZEGHRANE**

Présenté par :

**Mlle ZEGHDOUDI**

Soutenu le 05-09-2015 devant le jury:

**Mr. Saïd BOUARAB**

**Professeur**

**UMMTO**

**President**

**Mr. El Hocine MEGCHICHE**

**MCA**

**UMMTO**

**Examineur**

*2014-2015*

# Remerciements

*Ce sujet de master a été réalisé au laboratoire de Physique et Chimie Quantique LPCQ de l'Université Mouloud MAMMARI de Tizi-Ouzou, je tiens donc à commencer par remercier son directeur le professeur Hamid BOUZAR de m'avoir accueilli pendant ces six mois de stage sans oublier tous les autres membres du laboratoire qui nous ont permis de réaliser notre travail dans les meilleures conditions possibles.*

*Je voudrai exprimer ma gratitude envers tous les enseignants qui ont contribué à notre formation depuis notre premier cycle d'étude jusqu'à la fin de notre cycle universitaire.*

*Je voudrais remercier chaleureusement mon encadreur Abdelaziz MEZEGHRANE pour sa disponibilité, son encadrement a été pour beaucoup dans la réalisation de ce travail et l'enrichissement de mes connaissances et lors de la rédaction de ce manuscrit.*

*De la même façon je voudrais exprimer ma reconnaissance à Abderrahmane BELKHIR pour son aide et ses conseils précieux qui m'ont grandement aidé dans ce travail et à la disponibilité dont il a fait preuve envers moi.*

*Mes remerciements les plus sincères aux membres de jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter d'examiner ce modeste travail.*

*Des remerciements chaleureux et sincères à mes camarades où l'ambiance de travail était toujours au rendez-vous, un remerciement spécial pour une personne cher à mon cœur à mon amie plutôt sœur Lynda DEHBI "Merci d'être présente dans ma vie".*

*Je terminerai par les personnes extérieures au laboratoire mais qui ont eu un rôle important durant toute ces années d'études, alors j'en profite ici pour exprimer un grand merci à mes parents qui m'ont toujours soutenu ainsi que mon frère Khaled et mes sœurs Lamia, Amélia et Sihem.*

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Généralités sur les structures périodiques et les résonances de Fano</b>	<b>3</b>
1.1 Introduction . . . . .	3
1.2 Les cristaux photoniques . . . . .	3
1.3 Cristaux photoniques 1D . . . . .	4
1.3.1 Mode de Bloch . . . . .	5
1.3.2 Structure de bande . . . . .	6
1.4 Résonance Fano . . . . .	7
1.4.1 Description théorique des résonances Fano . . . . .	7
1.4.2 Mécanisme : analogie classique de deux oscillateurs couplés . . . . .	8
1.5 Techniques de fabrication des Cristaux Photoniques . . . . .	10
1.5.1 Conclusion . . . . .	12
<b>2 Outils numériques et implémentations</b>	<b>13</b>
2.1 Introduction . . . . .	13
2.2 Principe de base de la méthode FDTD . . . . .	13
2.2.1 Équations de Maxwell . . . . .	13
2.3 Algorithme de Yee : discrétisation des équations . . . . .	15
2.4 Stabilité et dispersion numériques . . . . .	17
2.5 Conditions aux limites . . . . .	18
2.5.1 Conditions périodiques . . . . .	18
2.5.2 Conditions d'absorption aux frontières : PML de Bérenger . . . . .	18
2.6 Structure de bande photonique 1D . . . . .	19
2.7 Conclusion . . . . .	21
<b>3 Excitations des résonances Fano dans des structures métallo-diélectriques périodiques 1D</b>	<b>22</b>
3.1 Introduction . . . . .	22
3.2 Test de validation . . . . .	22
3.3 Étude d'une structure périodique métallo-diélectrique 1D . . . . .	24
3.3.1 Présentation de la structure . . . . .	24
3.3.2 Calculs de modes propres et de diffraction . . . . .	24
3.4 Approche double période . . . . .	26
3.4.1 Excitation des modes de Bloch lents par application de la technique double période . . . . .	27
3.4.2 Calcul de modes propres . . . . .	27
3.4.3 Calcul de diffraction . . . . .	28
3.4.4 Effet de la nature du métal : cas de l'argent . . . . .	29
3.5 Effets des paramètres géométriques . . . . .	32
3.5.1 Effet de la variation du shift . . . . .	32

3.5.2	Variation de la hauteur . . . . .	33
3.6	Conclusion . . . . .	34
	<b>Conclusion générale</b>	<b>34</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>34</b>

# Table des figures

1.1	Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D).	4
1.2	Cristal photonique naturel : opale.	4
1.3	Cristal Photonique 1D de période $a$ d'alternance de couche $\varepsilon_1$ et $\varepsilon_2$ suivant $x$ et infini suivant $y$ et $z$ .	5
1.4	a) Relation de dispersion pour un cristal photonique 1D, b) Bande d'air et bande diélectrique au bord de la zone de Brillouin.	7
1.5	Forme de ligne des résonances Fano pour différentes valeurs de $q$ .	8
1.6	a) circuit RLC couplé à un circuit LC, b) système composé de deux oscillateurs harmoniques couplés par un ressort.	8
1.7	1) a) Amplitude du premier oscillateur en fonction de $\omega$ , b) comportement de la phase du premier oscillateur autour des résonances ; 2) a) Amplitude du second oscillateur en fonction de $\omega$ , b) comportement de la phase du second oscillateur autour des résonances.	10
1.8	Étapes de fabrication de cristaux photoniques par lithographie électronique.	11
2.1	Schéma de Yee (discrétisation spatiale à 3 dimensions).	16
2.2	PML de Bérenger	19
2.3	Intensité spectrale calculée au point X en fonction de la fréquence réduite.	20
2.4	Zone irréductible ( $\Gamma X$ ) pour : a) maille carrée, b) maille hexagonale	20
2.5	Structure de bande de la zone $\Gamma X$ .	20
3.1	Présentation du cristal photonique périodique 1D étudié en [27].	22
3.2	Calcul par FDTD de la transmission et structure de bande relevé de [27].	23
3.3	a) Spectre de transmission en fonction des unités réduites $a/\lambda=\omega a/2\pi c$ ; b) calcul de densité d'énergie.	23
3.4	Cristal photonique 1D de période $a=210$ nm; le motif est en or de largeur $w=60$ nm et de hauteur $h=350$ nm déposé sur un substrat de niobate de lithium $n=2.21$ .	24
3.5	Spectres de a) transmission et b) réflexion en fonction de la longueur d'onde de la structure à base de motif en or.	25
3.6	Intensité spectrale au point X en fonction de la longueur d'onde de la structure à base de motif en or.	25
3.7	Représentation de la modulation de position pour réaliser un cristal photonique de période double.	26
3.8	Structures de bande schématique d'un cristal photonique de période a) simple et b) double [27].	26
3.9	Cristal photonique 1D de double période $a=420$ nm. Le motif en or est de largeur $w=60$ nm et de hauteur $h=350$ nm déposé sur un substrat de niobate lithium $n=2.21$ .	27

3.10	Intensité spectrale au point $\Gamma$ en fonction de la longueur d'onde de la structure perturbée à base de motifs en or. . . . .	27
3.11	Spectres de a) réflexion et b) transmission en fonction de la longueur d'onde. . . . .	28
3.12	Spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde. . . . .	29
3.13	Cartographie du champ à la résonance $\lambda= 1420$ nm. . . . .	29
3.14	Cristal photonique 1D de double période $a=420$ nm. Le motif en argent est de largeur $w=60$ nm et de hauteur $h=350$ nm déposé sur un substrat de niobate de lithium $n=2.21$ . . . . .	30
3.15	Spectre de l'intensité spectral en fonction de la longueur d'onde $\lambda$ calculé au point $\Gamma$ . . . . .	30
3.16	Spectres de a) réflexion et b) transmission en fonction de la longueur d'onde . . . . .	31
3.17	Spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde. . . . .	31
3.18	Facteur de qualité en fonction du shift . . . . .	32
3.19	Spectres de a) réflexion et b) d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour un shift de 15 nm. . . . .	33
3.20	Facteur de qualité en fonction de la hauteur . . . . .	33

# Introduction générale

Les cristaux photoniques sont des matériaux nanostructurés d'indice de réfraction périodique. La propagation des photons dans ces nanostructures est régie par des équations analogues à celles qui gouvernent le mouvement des électrons dans les solides cristallins : certaines longueurs d'onde peuvent se propager tandis que d'autres non. Selon la périodicité le long d'un, deux ou trois axes, on qualifie le cristal d'uni-, de bi- ou de tridimensionnel. La recherche dans ce domaine est extrêmement active depuis une vingtaine d'années, et les applications industrielles avérées et potentielles sont nombreuses. Une des principales raisons du fort attrait des cristaux photoniques est la possibilité de localiser, manipuler et contrôler la lumière à des échelles sublongueur d'onde.

En 1961, Ugo Fano découvre un nouveau type de résonance en étudiant le phénomène d'autoionisation des atomes d'hélium « les résonances de Fano » [1]. La caractéristique des résonances de type Fano est d'avoir un profil asymétrique ; passage brusque d'un minimum de transmission vers un maximum de transmission. Plus récemment les résonances de Fano ont été identifiées dans des cristaux photoniques [2], des nanoparticules plasmoniques [3, 4] et des métamatériaux électromagnétiques [5].

## *Objectifs*

Ce travail porte sur l'étude et la modélisation des structures périodiques métal-diélectriques pouvant supporter des résonances Fano correspondant au couplage d'un mode de Bloch non radiatif avec une onde plane incidente. Il a été démontré que ces résonances Fano permettent d'obtenir un confinement de la lumière plus efficace que les résonances plasmoniques conventionnelles. Ces résonances Fano, généralement fines, peuvent être mises à profit pour des applications de piégeage optique, senseur biologique, communication et bien d'autre.

Ce manuscrit est constitué de 3 chapitres :

Le premier chapitre est une description générale des cristaux photoniques et des résonances Fano. Nous décrirons les cristaux photoniques de façon générale et plus particulièrement les cristaux photoniques 1D. Nous expliquerons le mécanisme des résonances Fano par des analogies avec des oscillateurs harmoniques et on terminera par présenter une des techniques de conception des cristaux photoniques.

Le second chapitre concerne la présentation de la méthode numérique que nous avons utilisée, à savoir la méthode FDTD (Finite Domain Time Difference). Elle nous permettra de caractériser complètement notre cristal photonique en faisant des calculs de structures de bande et de diffraction. Nous exposerons l'algorithme de Yee sur lequel est basée la méthode FDTD, les conditions de stabilité et de dispersion numériques ainsi que les conditions aux limites. Nous terminerons ce chapitre par donner un exemple de calcul de structure de bande photonique.

Dans le dernier chapitre, nous discuterons de l'excitation des résonances Fano dans le cas d'une structure périodique métal-diélectrique. La technique double période est exploitée pour exciter ces modes de résonance et une étude paramétrique est menée dans le but d'améliorer leur facteur de qualité.

Ce manuscrit se termine par une conclusion générale et quelques perspectives.



# Chapitre 1

## Généralités sur les structures périodiques et les résonances de Fano

### 1.1 Introduction

Depuis les premiers travaux de Yablonovitch et John en 1987 [6, 7], la notion de "Cristaux Photoniques" a suscité un vif intérêt dans beaucoup de domaines de recherche, et plus particulièrement la nanophotonique.

Les cristaux photoniques ont de nombreuses propriétés particulières qui proviennent de leur arrangement régulier suivant une ou plusieurs directions de l'espace. Ce qui rend l'utilisation des cristaux photoniques avantageux par rapport à d'autres structures, est le fait qu'ils font partie des seuls matériaux capables de « contrôler » les propriétés optiques de la lumière et de repousser les limites actuelles de la physique. En effet, ces structures permettent de dévier certains freins au développement scientifique dans les domaines tels que l'optique ondulatoire ou encore l'électromagnétisme, offrant ainsi la possibilité de réaliser des dispositifs photoniques capables de confiner, filtrer et guider la lumière à l'échelle de la longueur d'onde utilisée.

### 1.2 Les cristaux photoniques

Les cristaux photoniques sont des nano-objets artificiels diélectriques ou métallo-diélectriques dont l'indice optique est modulé de façon périodique suivant une, deux ou trois directions de l'espace (Figure 1.1) avec une période de l'ordre des longueurs d'onde utilisées [8, 9].

Ces structures périodiques ont la capacité d'inhiber la propagation de la lumière dans certaines directions pour une gamme de fréquences appelée bande interdite photonique (BIP [10]). Cette particularité optique est rendue possible lorsque la longueur de la maille du cristal est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de la lumière dans le milieu [11].

La propriété de bande interdite photonique a été initialement montrée par Lord Rayleigh en 1887 dans les structures de type miroir de Bragg, et ce n'est qu'en 1987 que Yablonovitch et John ont pu étendre les BIP à deux et trois dimensions [6, 7].

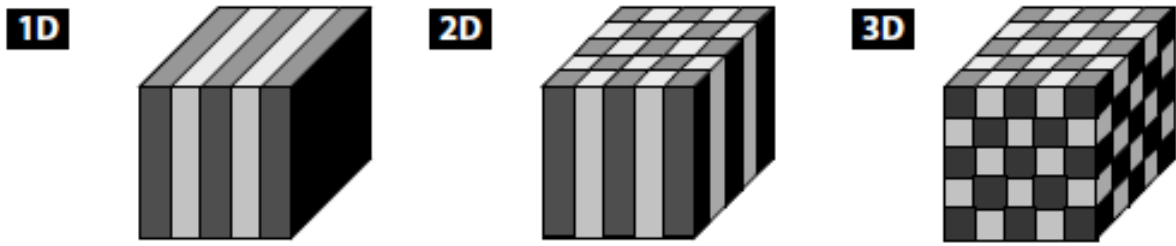


FIGURE 1.1 – Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D).

Les cristaux photoniques sont aussi présents à l'état naturel sous plusieurs formes. L'exemple le plus connu est l'opale : il s'agit d'un minéral semi-précieux, composé de particules de silice de tailles comprises entre 200 nm et 400 nm, espacées d'une distance correspondant à la longueur d'onde du spectre visible de la lumière. On observe lorsqu'on l'éclaire par une lumière blanche des reflets de plusieurs couleurs dites irisations (Figure 1.2) [12].

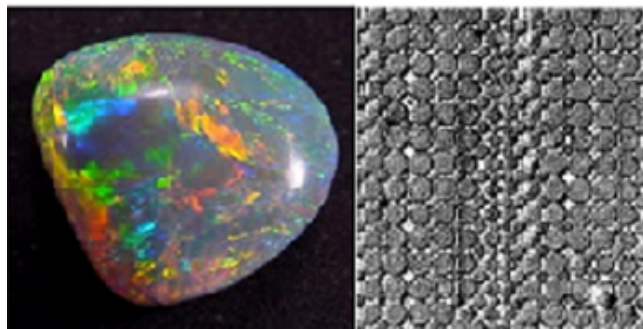


FIGURE 1.2 – Cristal photonique naturel : opale.

### 1.3 Cristaux photoniques 1D

Les structures unidimensionnelles, connues depuis longtemps ont été longuement étudiées et utilisées comme miroirs diélectriques, filtres optiques ou couches antireflets.

Un cristal photonique unidimensionnel (1D) est une succession infiniment périodique suivant une seule direction et uniforme dans les deux autres directions de l'espace de deux matériaux diélectriques ou métallo-diélectrique de permittivités diélectriques respectives  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  [9, 13]. Cette structure porte aussi le nom de miroir de Bragg (Figure 1.3).

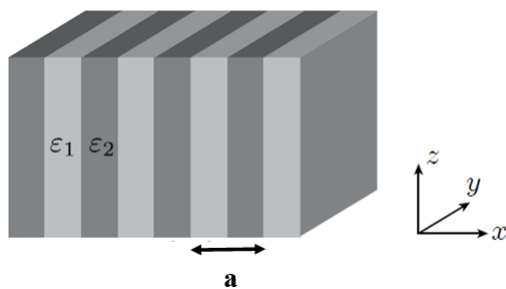


FIGURE 1.3 – Cristal Photonique 1D de période  $a$  d’alternance de couche  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  suivant  $x$  et infini suivant  $y$  et  $z$ .

### 1.3.1 Mode de Bloch

Les modes propres dits aussi mode de Bloch, sont solutions des équations de Maxwell d’un milieu périodique. Les définitions suivantes ont été puisées dans ces deux livres [9, 13]. En considérant un milieu diélectrique linéaire et isotrope, sans perte et sans source de lumière, les champs électriques et magnétiques ont une dépendance harmonique en temps et s’écrivent :

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r})e^{-i\omega t} \quad (1.1)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{-i\omega t} \quad (1.2)$$

Avec ces hypothèses, les équations de Maxwell se simplifient et on obtient ainsi la relation de base permettant de trouver les modes propres dans les cristaux photoniques. Le champ magnétique par exemple est donné par :

$$\vec{\nabla} \wedge \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}) \quad (1.3)$$

Où  $\varepsilon(\vec{r})$  est une fonction diélectrique et  $c$  la vitesse de la lumière.

Cette équation peut être réécrite sous la forme d’une équation aux valeurs propres :

$$\hat{\Theta} \vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}) \quad (1.4)$$

Où  $\hat{\Theta}$  est un opérateur tel que  $\hat{\Theta} = \left(\vec{\nabla} \wedge \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \wedge\right)$ .

$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$  représente la valeur propre.

La périodicité de la fonction diélectrique  $\varepsilon$  est donnée par :

$$\varepsilon(\vec{r} + \vec{R}) = \varepsilon(\vec{r}) \quad (1.5)$$

Où  $\vec{R}$  est le vecteur du réseau direct.

L’opérateur  $\hat{\Theta}$  étant hermétique et possédant cette symétrie de translation, le théorème de

Bloch implique que les modes de Bloch peuvent s'écrire comme suit :

$$\vec{H}_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,k}(\vec{r}) \quad (1.6)$$

$$u_{n,k}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,k}(\vec{r}) \quad (1.7)$$

$\mathbf{k}$  est le vecteur de Bloch compris entre  $-\pi/a$  et  $\pi/a$  dans la première zone de Brillouin, et  $n$  un entier indiquant le numéro de la bande.

Les modes de Bloch obtenus sont composés de fonctions de Bloch périodiques  $u_{n,k}$  et d'une fonction  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  décrivant la propagation du mode.

Les modes pouvant se propager dans le cristal photonique seront donnés par le calcul des  $u_k$  et des  $\omega(k)$  pour chaque vecteur d'onde  $k$  de la première zone de Brillouin. L'ensemble des solutions discrètes de  $\omega$  constitue ainsi **la structure de bande** ou le diagramme de dispersion de la structure périodique.

### 1.3.2 Structure de bande

Les structures de bandes sont représentées sur un graphe exprimant  $\omega$  en fonction de  $k$ . Dans le cas d'un milieu homogène, les caractéristiques de dispersion sont simplement des droites d'équation  $\omega = \pm \frac{ck}{\sqrt{\epsilon}}$  relatives aux ondes propagatives et aux ondes se propageant en contre propagation, La structuration périodique du milieu entraîne les processus de diffraction se traduisant par des translations successives.

Les ondes sont couplées par les processus de diffraction à chaque croisement, c'est-à-dire au bord et au centre de la zone de Brillouin, on a formation d'une bande interdite photonique (BIP) où aucun vecteur d'onde n'est associé à ces fréquences.

Au bord de la première zone de Brillouin, les modes optiques propres de la structure sont stationnaires et leur vitesse de groupe  $\frac{d\omega}{dk}$  est nulle (ces modes sont nommés **modes de Bloch lents**) : l'énergie électromagnétique du mode  $\omega_1$  se concentre dans le diélectrique tandis que celle du mode d'énergie  $\omega_2$  se concentre dans l'air. Pour cette raison, les bandes de transmission correspondantes sont désignées respectivement par *bande d'air* et *bande diélectrique* (Figure 1.4).

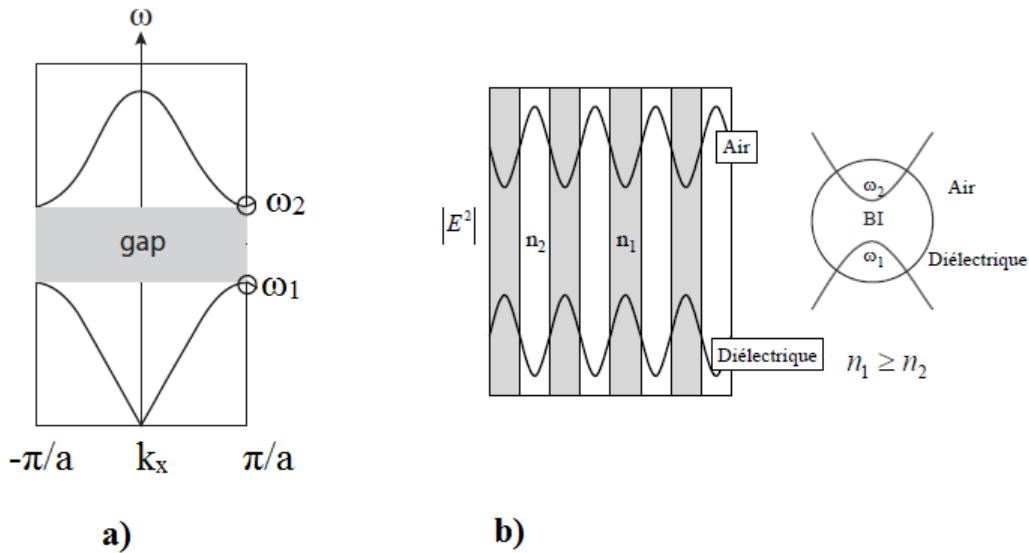


FIGURE 1.4 – a) Relation de dispersion pour un cristal photonique 1D, b) Bande d'air et bande diélectrique au bord de la zone de Brillouin.

## 1.4 Résonance Fano

Les résonances Fano ont été introduites pour la première fois par Ugo Fano en 1961, qui a aussi proposé une description théorique dans son célèbre article paru en 1961 [1]. C'est la présence inhabituelle de pics pointus dans le spectre d'absorption d'un gaz noble, observés par Beutler en 1935, qui a attiré son attention.

Une des principales caractéristiques de la résonance Fano, est d'avoir un profil de raie asymétrique bien distinct. Cette dissymétrie provient du couplage entre un état discret et un continuum. Ce type de résonance peut-être observé dans de nombreux domaines de la physique, comme en physique quantique [14], en plasmonique [15], mais aussi en photonique [16, 17].

La description rigoureuse de ce type de résonance nécessite de faire appel à une approche quantique. Dans le but d'une meilleure compréhension et par souci de simplicité nous allons plutôt montrer l'apparition des résonances Fano en utilisant une analogie classique de deux oscillateurs harmoniques couplés, dont l'un possède une résonance avec une largeur à mi-hauteur très importante par rapport au second oscillateur.

### 1.4.1 Description théorique des résonances Fano

L'effet Fano ne se limite pas à des systèmes quantiques, mais est un phénomène d'interférence d'onde très général qui a également été rencontré dans les spectres de transmission et de réflexion optiques, pour une grande variété de structures tels que les cristaux photoniques [18].

La forme exacte du profil obtenu dépend en effet de l'interaction entre l'état discret et le continuum d'état, cette interaction est quantifiée par un paramètre phénoménologique  $q$ . Dans le cas d'un état discret d'énergie  $E_d$  et de largeur  $\Gamma_d$ , le profil de la section efficace du

phénomène physique observé est montré en [1] :

$$\sigma(\kappa) = \frac{(\kappa + q)^2}{\kappa^2 + 1} \quad (1.8)$$

Où  $\kappa$  est l'énergie réduite définie par  $2(E-E_d)/\Gamma_d$ .

Le paramètre  $q$  caractérise le rapport des probabilités de transition entre l'état discret et le continuum, décrivant le degré d'asymétrie de la résonance (Figure 1.5).

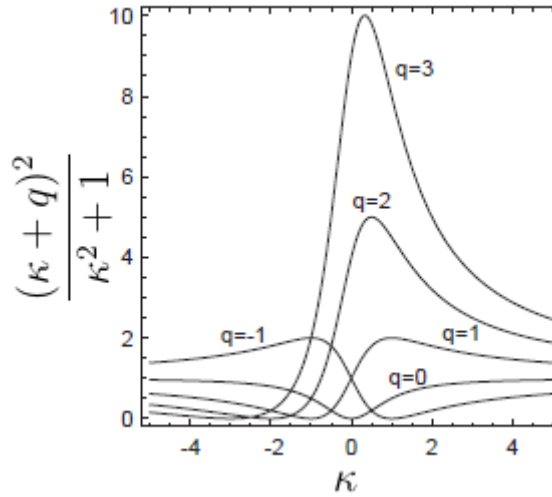


FIGURE 1.5 – Forme de ligne des résonances Fano pour différentes valeurs de  $q$ .

### 1.4.2 Mécanisme : analogie classique de deux oscillateurs couplés

Afin, de décrire et de bien comprendre le mécanisme des résonances Fano, on va les assimiler à un circuit RLC couplé à un circuit LC (Figure 1.6 (a)) [19], ou bien à un système équivalent de deux masses, chacune est attachée par un ressort à la paroi, avec un ressort supplémentaire entre elles (Figure 1.6 (b)). Les deux analogies : circuit RLC et les masses connectés satisfont les équations du mouvement de deux oscillateurs couplés [20, 21].

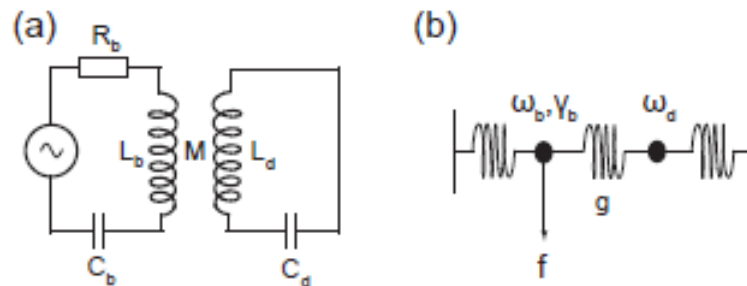


FIGURE 1.6 – a) circuit RLC couplé à un circuit LC, b) système composé de deux oscillateurs harmoniques couplés par un ressort.

On considère deux oscillateurs couplés avec un ressort, soumis à un amortissement respectives  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$ , le premier oscillateur est entretenu par une force extérieure de la forme

$ae^{i\omega t}$ . Les équations les caractérisant s'écrivent :

$$\ddot{x}_1 + \gamma_1 \dot{x}_1 + \omega_1^2 x_1 + vx_2 = ae^{i\omega t} \quad (1.9)$$

$$\ddot{x}_2 + \gamma_2 \dot{x}_2 + \omega_2^2 x_2 + vx_1 = 0 \quad (1.10)$$

$v$  est le paramètre de couplage des oscillateurs.

La résolution des deux équations précédentes, nous permet d'obtenir les déplacements  $x_1$  et  $x_2$  des deux oscillateurs :

$$x_1 = c_1 e^{i\omega t} \quad (1.11)$$

$$x_2 = c_2 e^{i\omega t} \quad (1.12)$$

Les amplitudes complexes  $c_1$  et  $c_2$  de la réponse spectrale des deux oscillateurs sont données par :

$$c_1 = \frac{(\omega_2^2 - \omega^2 + i\gamma_2\omega)}{(\omega_1^2 - \omega^2 + i\gamma_1\omega)(\omega_2^2 - \omega^2 + i\gamma_2\omega) - v^2} a \quad (1.13)$$

$$c_2 = \frac{-v}{(\omega_1^2 - \omega^2 + i\gamma_1\omega)(\omega_2^2 - \omega^2 + i\gamma_2\omega) - v^2} a \quad (1.14)$$

Les modules  $|c_1|$  et  $|c_2|$  et les phases  $\phi_1$  et  $\phi_2$  correspondantes peuvent se déduire par les relations suivantes :

$$c_1 = |c_1(\omega)| e^{-i\phi_1(\omega)} \quad (1.15)$$

$$c_2 = |c_2(\omega)| e^{-i\phi_2(\omega)} \quad (1.16)$$

En considérant le paramètre du second oscillateur nul ( $\gamma_2=0$ ), L'amplitude du premier oscillateur  $c_1$  est une fonction de la fréquence de la force externe et elle est représentée sur la (Figure 1.7 (1-a)), les paramètres utilisés sont tels que :  $\gamma_1 = 0,025$  et  $v = 0,1$ .

Il y a apparition de deux pics, le premier est un pic symétrique (lorentzienne) observé à  $\omega \approx 1$ , et le second est un pic asymétrique (Fano) à  $\omega \approx 1.21$ . L'asymétrie du deuxième pic de résonance est due à l'existence de la fréquence zéro au voisinage de  $\omega_0 = \omega_2 = 1.2$ .

Il peut être vu à partir de l'équation (1.6), que l'amplitude de  $c_1$  devient égale à zéro quand  $\omega_2 = \omega$ . L'amplitude du second oscillateur  $c_2$  tend vers  $a/v$  dans l'équation (1.7) à la fréquence  $\omega_0$  (Figure 1.7 (2-a)).

Les phases des deux oscillateurs sont modifiées lorsque la fréquence passe par les résonances (Figures 1.7 (1-b) et (2-b)). En effet, on constate que le premier oscillateur est en opposition de phase avec le deuxième oscillateur quand  $\omega = \omega_0$ . En faisant varier  $\gamma_2$  il a été observé que l'amplitude du pic asymétrique du premier oscillateur dépend de la largeur à mi-hauteur du second oscillateur par la constante  $\gamma_2$ .

La raison pour laquelle un profil de résonance asymétrique est observé est qu'au voisinage

de la résonance, la phase entre la réponse et l'excitation évolue rapidement, c'est la proximité d'interférences constructives et destructives.

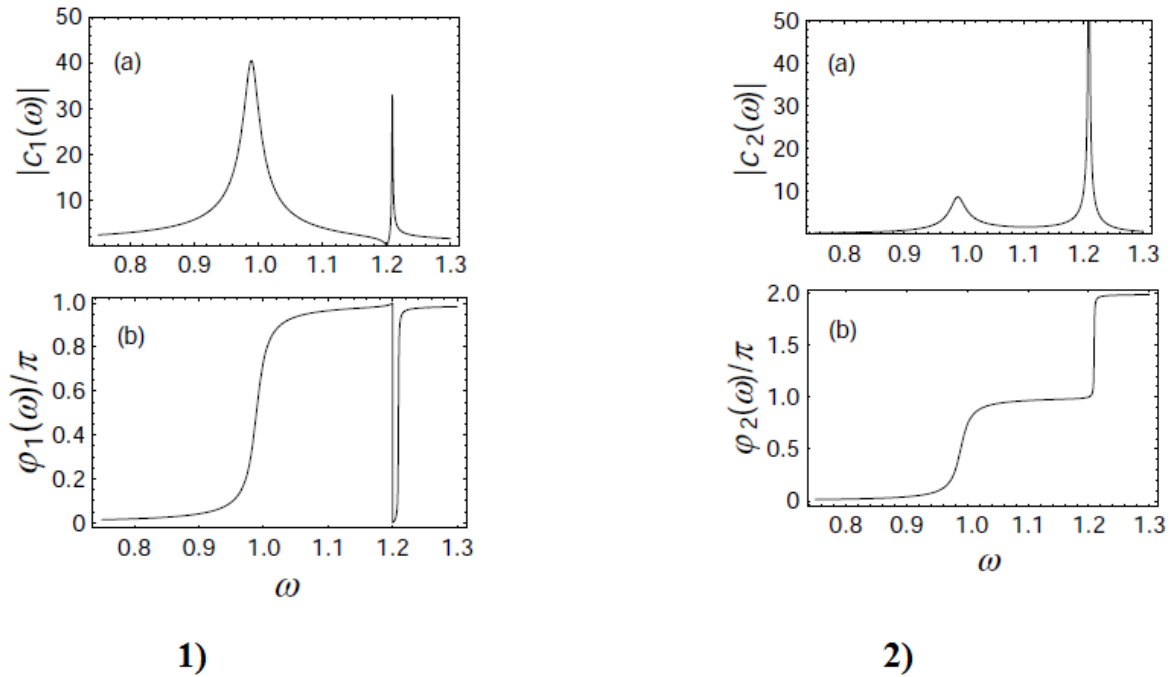


FIGURE 1.7 – 1) a) Amplitude du premier oscillateur en fonction de  $\omega$ , b) comportement de la phase du premier oscillateur autour des résonances ; 2) a) Amplitude du second oscillateur en fonction de  $\omega$ , b) comportement de la phase du second oscillateur autour des résonances.

## 1.5 Techniques de fabrication des Cristaux Photoniques

Il existe plusieurs techniques de fabrications des cristaux photoniques, on a choisi d'en décrire la méthode de lithographie électronique, car c'est une méthode très utilisée dans le domaine des nanotechnologies. Elle se distingue par sa finesse d'écriture et elle permet d'écrire directement sur la couche photosensible.

### Lithographie électronique

La lithographie électronique est une technique d'impression qui consiste à imprégner un motif sur un échantillon, elle utilise la focalisation d'un faisceau d'électrons sur la surface de l'échantillon grâce à des lentilles électromagnétiques, qui dévient le faisceau électronique et balaye la surface point par point. La surface de l'échantillon est recouverte par une résine sensible à l'irradiation des électrons accélérés, couramment c'est le PMMA<sup>1</sup> qui est utilisé ; c'est une résine de premier choix. La couche de résine est éliminée aux endroits où il y a eu irradiation. Elle peut maintenant servir de masque.

La lithographie électronique permet d'atteindre une résolution allant jusqu'à 20 nm et voir

1. PMMA (PolyMethyl-MethAcrylate).



même jusqu'à 10 nm dans les conditions idéales. Néanmoins, il y a plusieurs mécanismes qui imposent des limites à cette méthode, en guise d'exemple la diffusion des électrons à petits angles lors du contact avec la couche PMMA, provoquant ainsi l'élargissement du faisceau d'électrons.

### Étapes du processus de fabrication

La fabrication des cristaux photoniques demande plusieurs étapes qui sont détaillées sur la (Figure 1.8) :

- a). Croissance des hétérostructure par épitaxie par jets moléculaires MBE<sup>2</sup>.
- b-d). Une couche de PMMA est déposée sur l'hétérostructure sur laquelle le motif est écrit par lithographie électronique.
- e). Le motif sur le PMMA est transféré dans la couche par une gravure sèche.
- f). La résine est développée, le motif est alors créé à la surface de l'échantillon.

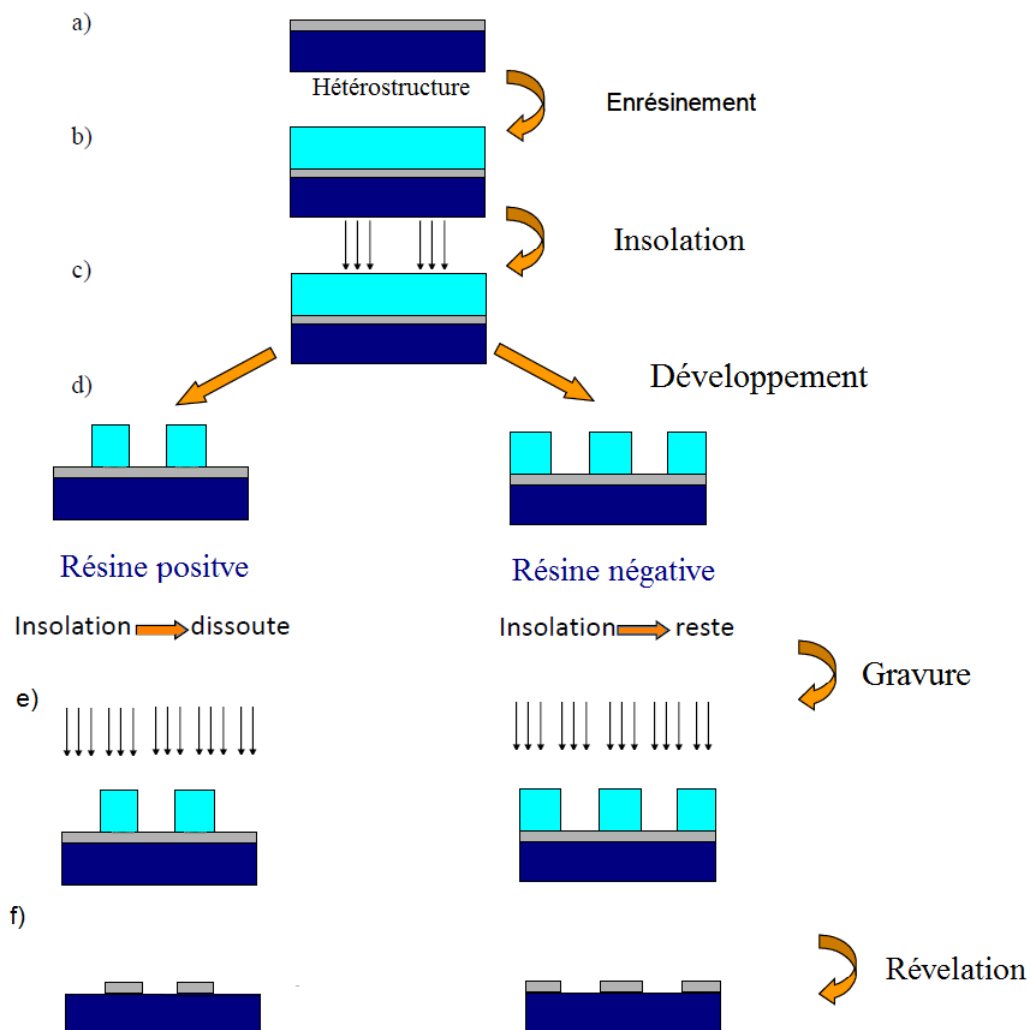


FIGURE 1.8 – Étapes de fabrication de cristaux photoniques par lithographie électronique.

### 1.5.1 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les notions de base associées aux cristaux photoniques et plus particulièrement le cas unidimensionnel. Ensuite, en puisant de la littérature nous avons introduit les résonances de Fano et pour mieux rendre compte des mécanismes qui régissent ce type de résonance une analogie avec les oscillateurs harmoniques couplés est décrite. Pour finir, nous avons abordé la technique d'élaboration des structures périodiques par lithographie électronique.

Le chapitre suivant sera entièrement dédié à la présentation de la méthode de simulation FDTD (méthode des différences finies dans le domaine temporel).

# Chapitre 2

## Outils numériques et implémentations

### 2.1 Introduction

Depuis l'algorithme proposé par Kane S. Yee en 1966 [22], la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD : *Finite Difference Time Domain*) est devenue l'une des méthodes les plus utilisées en électromagnétisme. Elle offre la possibilité de simuler la plupart des systèmes dans des situations générales (nature de la source, milieu, dispersion, anisotropie...).

Cette méthode de calcul permet de résoudre numériquement les équations de Maxwell via une double discrétisation de l'espace et du temps. Ainsi, les opérateurs aux dérivées partielles apparaissant dans les équations de Maxwell seront substitués par des différences finies centrées et ces équations seront résolues en fonction des conditions initiales et aux limites. La méthode FDTD permet de calculer les structures de bande et de simuler la propagation de la lumière dans les structures à base de cristaux photoniques. Elle permet de calculer l'évolution temporelle du champ électromagnétique, la réponse spectrale du système est déduite par sa transformée de Fourier.

### 2.2 Principe de base de la méthode FDTD

Comme il a été rapporté plus haut, la méthode FDTD est basée sur l'algorithme de Yee qui résout les équations de Maxwell en discrétisant à la fois l'espace et le temps. Le paragraphe suivant sera consacré au rappel de ces équations.

#### 2.2.1 Équations de Maxwell

Les équations de Maxwell caractérisent la propagation d'une onde électromagnétique à l'intérieur d'un milieu par l'intermédiaire des champs électriques et magnétiques en fonction de la permittivité diélectrique  $\varepsilon$ , la perméabilité magnétique  $\mu$  et la conductivité électrique  $\sigma$ . En l'absence de charges libres, les équations de Maxwell s'écrivent sous leur forme diffé-

rentielle suivante :

$$\overrightarrow{rotE} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\overrightarrow{rotH} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.2)$$

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

$$div \vec{H} = 0 \quad (2.4)$$

Les equations de Maxwell précédentes sont complétées par les deux équations constitutives suivantes :

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

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

$\vec{B}$  et  $\vec{D}$  représentent respectivement l'induction magnétique et le déplacement électrique du milieu.

La projection des équations (2.1) et (2.2) dans un repère cartésien de coordonnées x, y et z donne :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (2.12)$$

## 2.3 Algorithme de Yee : discrétisation des équations

Le calcul des composantes électriques et magnétiques se fait en des points discrets bien particuliers, de telle façon que les composantes électriques se calculent aux milieux des arêtes (appelés nœuds électriques) et les composantes magnétiques se calculent aux milieux des faces (appelés nœuds magnétiques) du schéma de Yee (Figure 2.1). Chaque composante de  $\vec{H}$  est entourée par quatre composantes de  $\vec{E}$  et de la même manière chaque composante de  $\vec{E}$  est entourée par quatre composantes de  $\vec{H}$ .

Les coordonnées d'espace et du temps s'écrivent en fonction d'indices entiers  $i, j, k$  et  $n$  :  $x=i\Delta x, y=j\Delta y, k=k\Delta z$  et  $t=n\Delta t$ , où  $\Delta x, \Delta y$  et  $\Delta z$  sont des pas spatiaux respectivement suivant  $x, y$  et  $z$  et  $\Delta t$  le pas temporel.

La résolution du système d'équations précédent est basée sur un schéma de discrétisation aux différences finies centrées.

Les dérivées spatiales et temporelles des composantes  $u(x_i, y_j, z_k, t)$  sont approximées à partir de leur développement de Taylor au second ordre. On désigne par  $u$  une composante du champ électromagnétique, qui s'écrit :

$$u(x_i, y_j, z_k, t) = u(i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z, n \Delta t) = u_{i,j,k}^n \quad (2.13)$$

La dérivée spatiale suivant  $x$  de  $u$  est donnée par :

$$\frac{\partial u_{i,j,k}^n}{\partial x} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta x} + o([\Delta x]^2) \quad (2.14)$$

Il en est de même pour la dérivée temporelle.

$$\frac{\partial u_{i,j,k}^n}{\partial t} = \frac{u_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j,k}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + o([\Delta t]^2) \quad (2.15)$$

Les composantes électriques sont calculées aux instants  $n\Delta t$ , et les composantes magnétiques sont décalées d'un demi pas de temps et donc calculées aux instants  $(n+\frac{1}{2})\Delta t$ . Cette disposition assure un processus itératif entièrement explicite qui permet de s'affranchir des inversions de matrice.

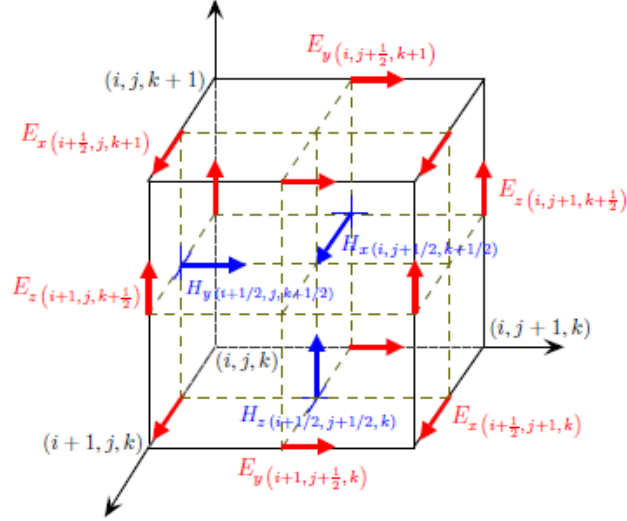


FIGURE 2.1 – Schéma de Yee (discrétisation spatiale à 3 dimensions).

Le développement des équations de (2.7) jusqu'à (2.12) selon le schéma de Yee [22] est le suivant :

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_y^n(i, j, k+1) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j+1, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta y} \right] \quad (2.16)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_y^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_z^n(i+1, j, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i, j, k+1) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta z} \right] \quad (2.17)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_x^n(i, j+1, k) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1, j, k) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (2.18)$$

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = E_x^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left[ \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j-1, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k-1)}{\Delta z} \right] \quad (2.19)$$

$$E_y^{n+1}(i, j, k) = E_y^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left[ \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i-1, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (2.20)$$

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = E_z^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left[ \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i-1, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j-1, k)}{\Delta y} \right] \quad (2.21)$$

Ces equations permettent de mettre à jour les 6 composantes du champ électrique et magnétique dans la grille FDTD et aux différents instants d'échantillonnage temporel.

## 2.4 Stabilité et dispersion numériques

Le schéma de Yee est soumis à un critère de stabilité afin d'éviter que les champs divergent numériquement et atteignent des valeurs non physiques. Des conditions sur le pas de temps  $\Delta t$  mais aussi sur les pas d'espace  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  doivent être respectées. À trois dimensions ce critère est connu sous le nom de CFL (Courant–Friedrichs–Lewy), son expression est donnée en [23] par :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.22)$$

$v_{max}$  est la vitesse maximale de propagation dans le milieu considéré, en général c'est la vitesse de la lumière dans le vide.

Un autre problème à prendre en considération est la dispersion numérique, provoquée lors de la discrétisation des équations de Maxwell (passage des equations du cas continu au cas discret) et où la vitesse de phase n'est plus égale à la vitesse de la lumière dans le vide. Ceci provoque notamment des erreurs de phase, une anisotropie numérique et des déformations

de signaux.

Afin d'éviter ce type de problème, il suffit de mailler très fin dans la grille FDTD, de l'ordre de  $\lambda_{min}/18$  avec  $\lambda_{min}$  la longueur d'onde minimale des ondes se propageant dans la grille FDTD [24].

## 2.5 Conditions aux limites

Aux frontières du domaine tronqué de la fenêtre FDTD, les composantes du champ électrique et magnétique ne peuvent être calculées car il manque certaines valeurs voisines. Afin, de lever cette indétermination, on fait appel aux conditions d'absorption aux frontières PML (Perfectly Matched Layer) de Bérenger, et afin de simuler un espace infiniment périodique on fait appel aux conditions périodiques de Floquet Bloch.

### 2.5.1 Conditions périodiques

Les conditions aux limites périodiques s'appliquent pour modéliser les réseaux périodiques infinis. Elles sont directement issues du théorème de Floquet Bloch. Pour modéliser un cristal photonique, on ne prend en considération qu'une seule maille élémentaire. Pour reproduire tout le cristal, les conditions aux limites sont périodiques et sont appliquées aux limites du domaine tronqué.

Dans le cas des structures périodiques suivant  $x$ , les champs électriques et magnétiques soumis aux conditions aux limites s'écrivent :

$$\vec{E}(x + a, y, z, t) = \vec{E}(x, y, z, t) \exp(ik_x a) \quad (2.23)$$

$$\vec{H}(x + a, y, z, t) = \vec{H}(x, y, z, t) \exp(ik_x a) \quad (2.24)$$

### 2.5.2 Conditions d'absorption aux frontières : PML de Bérenger

La technique PML (Perfectly Matched Layer) de Bérenger [25] est basée sur l'utilisation d'une couche absorbante entourant complètement la zone de calcul FDTD suivant les directions ouvertes (Figure 2.2). Ces couches artificielles sont destinées à absorber sans réflexion vers l'objet les ondes incidentes ayant des angles d'incidence quelconques, afin de simuler artificiellement un espace infini.

Le principe repose sur la condition d'adaptation d'impédance entre deux milieux de même indice dont l'un est absorbant. Cette condition s'exprime comme suit :

$$\frac{\sigma^e}{\varepsilon} = \frac{\sigma^m}{\mu} \quad (2.25)$$

$\sigma^e$  et  $\sigma^m$  représentent respectivement la conductivité électrique et magnétique du milieu



PML.

Pour optimiser l'absorption et minimiser les réflexions parasites, on impose une augmentation progressive de façon polynomiale de l'absorption  $\sigma$  dans la couche PML [26] :

$$\sigma = \left(\frac{x_{pml}}{e_{pml}}\right)^m \sigma_{max} \quad (2.26)$$

$x_{pml}$  est la profondeur dans le milieu PML mesurée à partir de l'interface,  $e_{pml}$  représente l'épaisseur de la PML,  $\sigma_{max}$  la conductivité maximale et  $m$  dénote le degré de la loi polynomiale qui est généralement égal à 2.

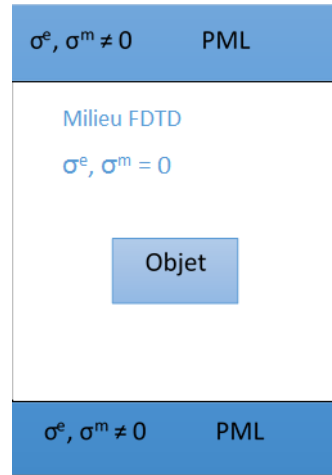


FIGURE 2.2 – PML de Bérenger

## 2.6 Structure de bande photonique 1D

Pour étudier les propriétés d'un cristal photonique, il est très important de connaître les modes propres de cette structure.

Pour le calcul de structures de bandes, on injecte un signal de manière à exciter toutes les fréquences possibles de la structure [24]. Ce signal est introduit de manière à respecter la loi de Gauss ( $\text{div}(\vec{E}) = 0$ ) et est donné comme suit :

$$\vec{E} = \sum_G (\vec{v} \wedge (\vec{k} + \vec{G}) \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r})) \quad (2.27)$$

$\vec{v}$  est un vecteur aléatoire,  $\vec{k}$  et  $\vec{G}$  désignent respectivement le vecteur d'onde et les vecteurs du réseau réciproque.

On effectue un calcul de l'évolution de la densité volumique d'énergie en fonction de la fréquence, le calcul ne sera arrêté que lorsque le spectre obtenu est quasi stable.

Un exemple de calcul des fréquences propres d'une structure au point X ( $k_x = \frac{\pi}{a}, k_y = 0$ ) de la zone de Brillouin est montré sur la (Figure 2.3). Les pics apparaissant sur ce spectre

correspondent aux fréquences propres de la structure étudiée.

Cette structure correspond à un cristal photonique 1D, composé d'un motif rectangulaire d'indice optique  $n=3$  dans un milieu d'air  $n=1$ . De période  $a=1 \mu\text{m}$ , la largeur du motif est  $w=0.5 \mu\text{m}$  et de hauteur  $h=0.35 \mu\text{m}$ , le nombre d'itérations effectué est de 250000.

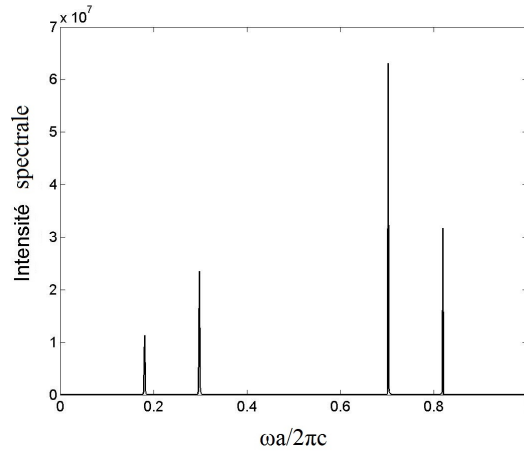


FIGURE 2.3 – Intensité spectrale calculée au point X en fonction de la fréquence réduite.

La structure de bande photonique complète s'obtient en balayant tout le contour de la zone de Brillouin irréductible ( $\Gamma XM$ ) (Figure 2.4). Dans le cas de l'exemple précédent, on balaye seulement la zone ( $\Gamma X$ ) (Figure 2.5).

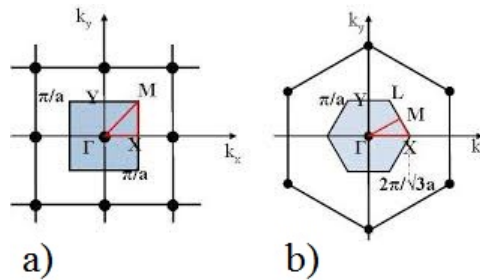


FIGURE 2.4 – Zone irréductible ( $\Gamma XM$ ) pour : a) maille carrée, b) maille hexagonale

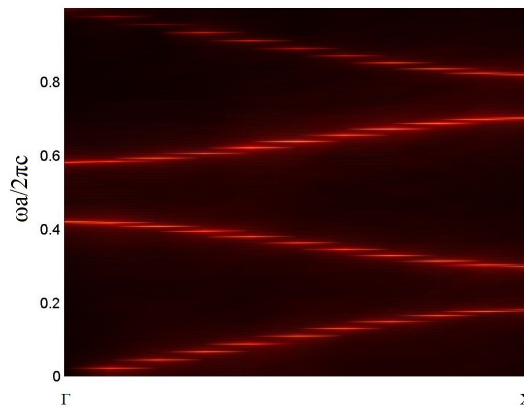


FIGURE 2.5 – Structure de bande de la zone  $\Gamma X$ .

## 2.7 Conclusion

La technique des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) est largement utilisée dans différentes situations. Nous allons énumérer dans ce qui suit quelques avantages et inconvénients de cette méthode :

### **Avantages :**

- Implémentation facile dotée d'un principe intuitif et aisément compréhensible.
- Méthode temporelle permettant de connaître le champ électromagnétique à chaque instant et en tout point de l'espace.
- Modélise les géométries les plus complexes d'un système.
- Capable de donner des résultats précis même sur des structures à fort contraste d'indice comme les cristaux photoniques.
- Elle est large bande ; un seul calcul suffit pour obtenir les caractéristiques spectrales d'un système sur une large gamme de fréquence et ce par une simple transformation de Fourier.

### **Inconvénients :**

- Méthode impliquant le maillage du domaine de calcul avec un pas suffisamment petit pour échantillonner la plus petite longueur d'onde et le plus petit détail géométrique de la structure, on peut aboutir à de très grandes zones de calcul en termes de maillage, qui entraînent des temps de calcul longs et une capacité en mémoire de stockage énorme.

Bien que des inconvénients existent, la méthode FDTD est de loin la plus utilisée pour la modélisation des phénomènes électromagnétiques et elle est particulièrement bien adaptée pour la modélisation des structures à cristaux photoniques.

# Chapitre 3

## Excitations des résonances Fano dans des structures métallo-diélectriques périodiques 1D

### 3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude des mécanismes d'excitation des résonances de Fano dans des cristaux photonique unidimensionnel. l'étude commence par un test de validation du code FDTD adapté. La technique double période est exploitée pour mieux rendre compte de l'excitation des résonances de Fano. Une étude paramétrique est réalisée dans le but d'améliorer le facteur de qualité de ces résonances, et qui traduit la capacité de la cavité à piéger de la lumière.

### 3.2 Test de validation

Afin de valider le code FDTD que nous avons adapté pour ce type d'étude, nous avons refait l'étude effectuée dans la référence [27].

La structure considérée est composée d'un réseau périodique de motifs rectangulaires, d'indice optique  $n=3$ , plongées dans l'air  $n=1$  (Figure 3.1). La période du réseau 1D est  $a=1\ \mu\text{m}$ , la hauteur et la largeur des motifs sont respectivement  $h=0.65\ \mu\text{m}$  et  $w=0.5\ \mu\text{m}$ .

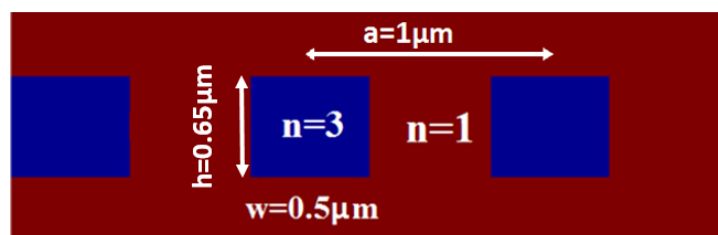


FIGURE 3.1 – Présentation du cristal photonique périodique 1D étudié en [27].

La structure est excitée avec une onde plane en incidence normale, polarisée TE<sup>1</sup>. La figure 3.2 montre la courbe de dispersion (à droite) et le spectre de transmission (à gauche) obtenus en [27] et mettant en évidence l'excitation du mode de Bloch correspondant à la résonance de Fano au point  $\Gamma$  ( $k_z=0$ ).

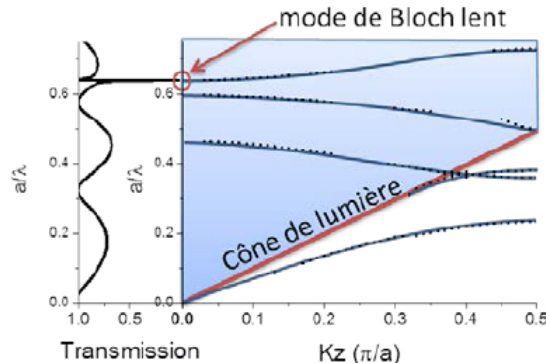


FIGURE 3.2 – Calcul par FDTD de la transmission et structure de bande relevé de [27].

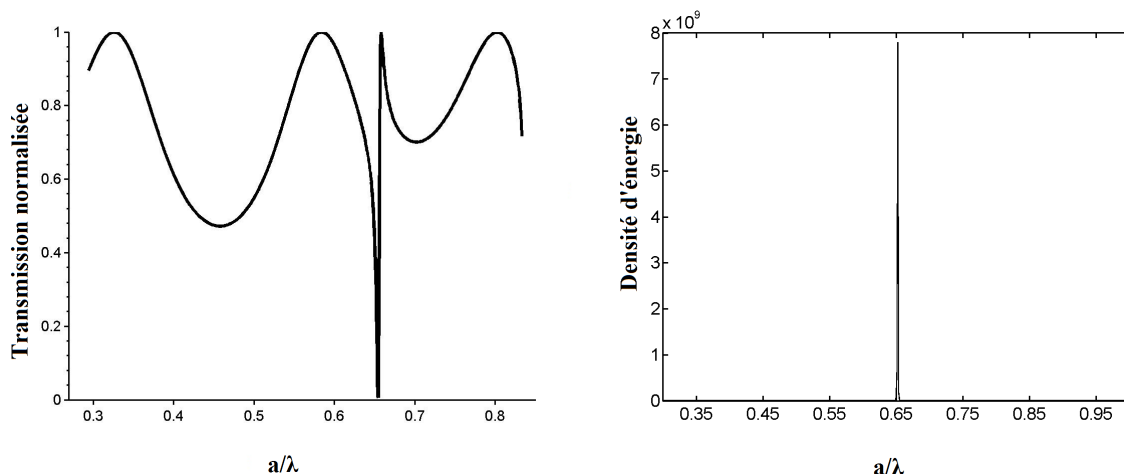


FIGURE 3.3 – a) Spectre de transmission en fonction des unités réduites  $a/\lambda = \omega a / 2\pi c$ ; b) calcul de densité d'énergie.

Les résultats de notre propre simulation sont rapportés sur la figure 3.3. La densité d'énergie spectrale (Figure 3.3.b) montre la présence d'un mode propre (mode de Bloch) à  $a/\lambda = 0.65$ . Le spectre de transmission (figure 3.3.a) exhibe quant à lui une discontinuité à la même valeur de  $a/\lambda$ . La forme asymétrique de la discontinuité du spectre de transmission conjuguée à la présence d'un mode de Bloch à cette discontinuité constitue une signature de l'excitation d'une résonance Fano. Ceci est d'autant justifié qu'à cet endroit on est loin des anomalies de Wood et les plasmons de surface ne peuvent être excités sachant que la structure est diélectrique et l'onde incidente est polarisée TE.

Nos résultats (Figure 3.3) sont en bon accord avec ceux obtenus dans la référence [27], ce qui constitue une validation de notre code FDTD.

---

1. Transverse Electric

## 3.3 Étude d'une structure périodique métallo-diélectrique 1D

### 3.3.1 Présentation de la structure

La structure considérée est un réseau périodique de période  $a=210$  nm, constituée d'un motif rectangulaire métallique en or de 350 nm de hauteur et de 60 nm de largeur, déposée sur un substrat de niobate de lithium d'indice optique  $n=2,21$ . Le milieu transmis est de l'air (Figure 3.4).

Pour bien décrire la structure étudiée, nous avons utilisé un maillage fin avec un pas de 2 nm. La dispersion de l'or dans la gamme optique est prise en considération par le modèle de Drude à deux points critiques intégré à la FDTD [28].

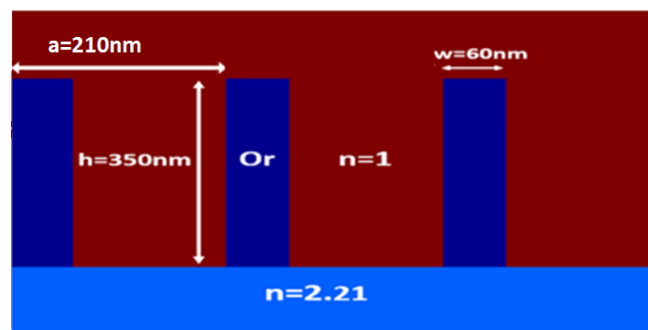


FIGURE 3.4 – Cristal photonique 1D de période  $a=210$  nm ; le motif est en or de largeur  $w=60$  nm et de hauteur  $h=350$  nm déposée sur un substrat de niobate de lithium  $n=2.21$ .

### 3.3.2 Calculs de modes propres et de diffraction

Nous avons excité la structure en incidence normale avec une onde électromagnétique polarisée  $TM^2$ . Les spectres de transmission et de réflexion obtenus sont représentés sur la figure(3.5). Nous constatons que sur les deux spectres il n'y a pas de résonances Fano identifiables. Il y a absence de discontinuité apparente sur le spectre de transmission et de réflexion, cela est peut être due au fait qu'il n'y a pas eu couplage entre l'onde incidente et les modes propres de la structure et/ou il est très faible. Comme les résonances Fano à haut facteur de qualité correspondent à l'excitation de modes de Bloch lents qui se trouvent localisés en bord de la zone de Brillouin, nous avons exploré le Point X de cette zone. Un calcul de bande au point X du réseau réciproque de cette structure est effectué et la densité d'énergie spectrale est représentée sur la figure (3.6). Sur cette figure on note la présence de deux pics correspondant à deux modes de Bloch dont la position du plus intense est située à  $\lambda = 1420$  nm. Cependant leur excitation demeure délicate en incidence normale d'où la nécessité d'avoir recours à la technique double période -technique consistant à perturber un motif sur deux de la structure (Figure 3.7)- permettant d'effectuer un repliement de bande et ainsi ramener les modes présents au point X au point  $\Gamma$ .

---

2. Transverse Magnétique

Le calcul de modes propres est effectué au point X de la structure où  $(k_x=\pi/a, k_y=0)$ .

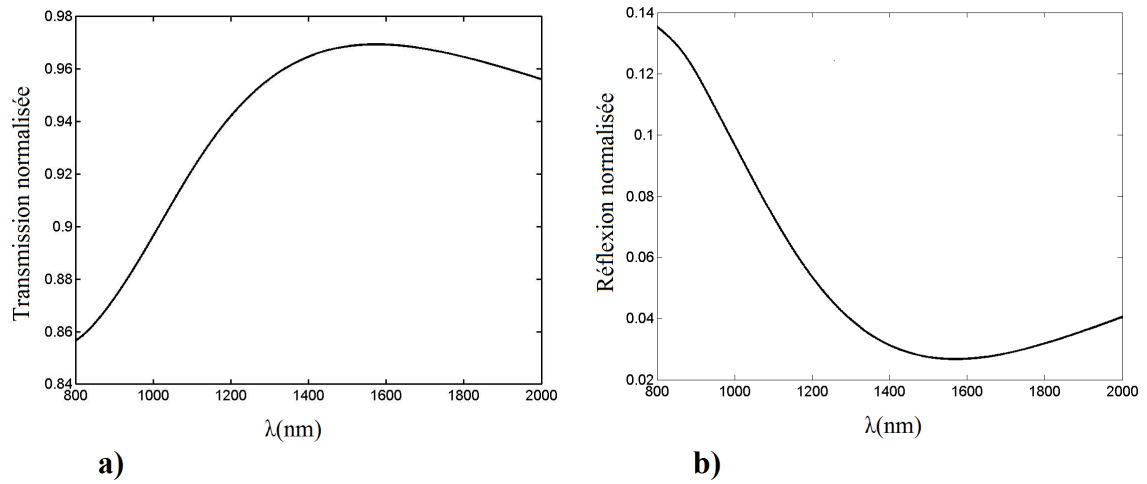


FIGURE 3.5 – Spectres de a) transmission et b) réflexion en fonction de la longueur d'onde de la structure à base de motif en or.

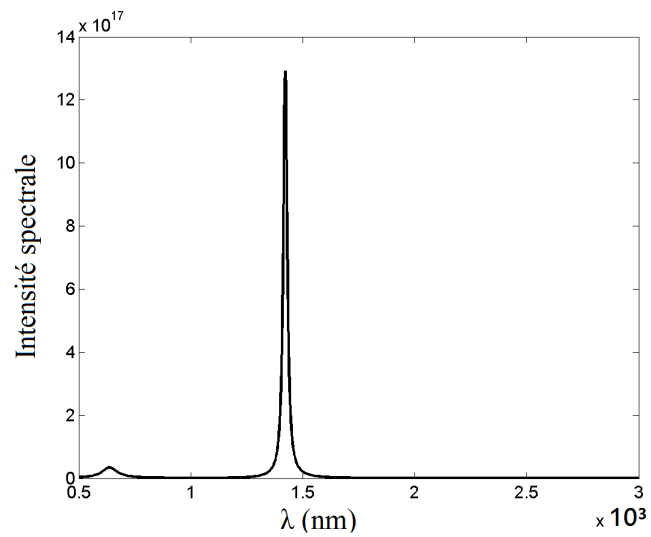


FIGURE 3.6 – Intensité spectrale au point X en fonction de la longueur d'onde de la structure à base de motif en or.

### 3.4 Approche double période

Avant d'appliquer la technique double période sur notre structure, nous avons juger utile de donner un aperçu didactique sur cette technique. Pour cela, considérons le réseau 1D et sa courbe de dispersion représentés sur la figure 3.8.a). Les modes se trouvant en bord de bande situé sous le cône de lumière  $\omega = kc$  au point X sont lents et leurs coefficient de qualité est virtuellement infini, mais on ne peut les exciter avec un objectif en incidence normale. L'approche double période consiste à faire une petite perturbation à la structure c-à-d une modulation en position et cela en effectuant un déplacement (shift) d'un motif sur deux de la structure (Figure 3.7), afin d'avoir un repliement de bande en  $\pi/2a$  (Figure 3.8.b). Ainsi on peut exciter les modes de Bloch lents se trouvant sous le cône de lumière qui présentent un facteur de qualité important.

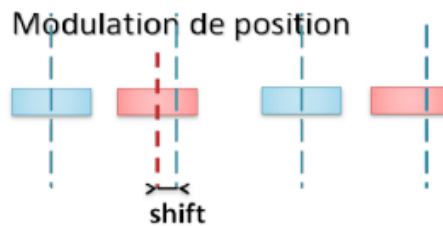


FIGURE 3.7 – Représentation de la modulation de position pour réaliser un cristal photonique de période double.

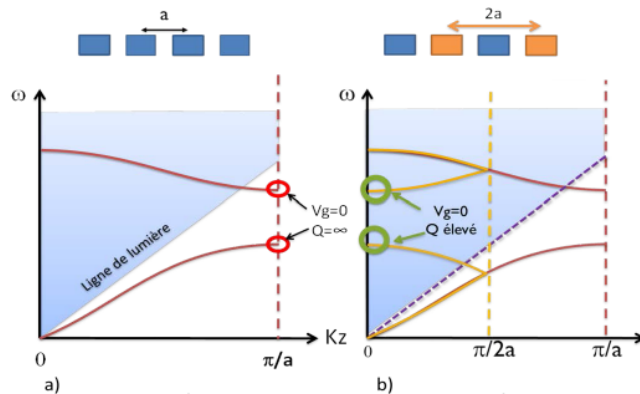


FIGURE 3.8 – Structures de bande schématique d'un cristal photonique de période a) simple et b) double [27].



### 3.4.1 Excitation des modes de Bloch lents par application de la technique double période

Pour ramener les modes propres présents au point X (Figure 3.6) au point  $\Gamma$  de la zone de Brillouin nous allons user de la technique double période. La structure perturbée est représentée sur la figure 3.9. C'est la même structure présentée plus haut dans la section 3.3, elle a été perturbée d'un shift de 50 nm et la période est doublée ;  $a=420$  nm (Figure 3.9).

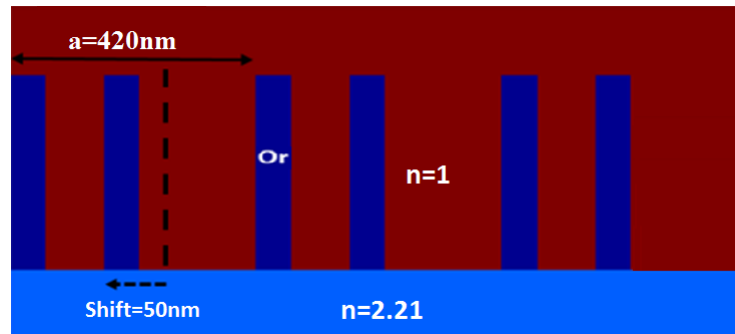


FIGURE 3.9 – Cristal photonique 1D de double période  $a=420$  nm. Le motif en or est de largeur  $w=60$  nm et de hauteur  $h=350$  nm déposé sur un substrat de niobate lithium  $n=2.21$ .

### 3.4.2 Calcul de modes propres

Le calcul du mode propre est effectué au point  $\Gamma$  ( $k_x=0, k_y=0$ ) de la structure perturbée. Comme illustré sur la figure 3.10, nous constatons la présence d'un mode intense autour de 1420 nm. Pour voir si un continuum incident peut se coupler avec ce mode propre discret, nous avons effectué un calcul de réflexion et de transmission à travers cette structure.

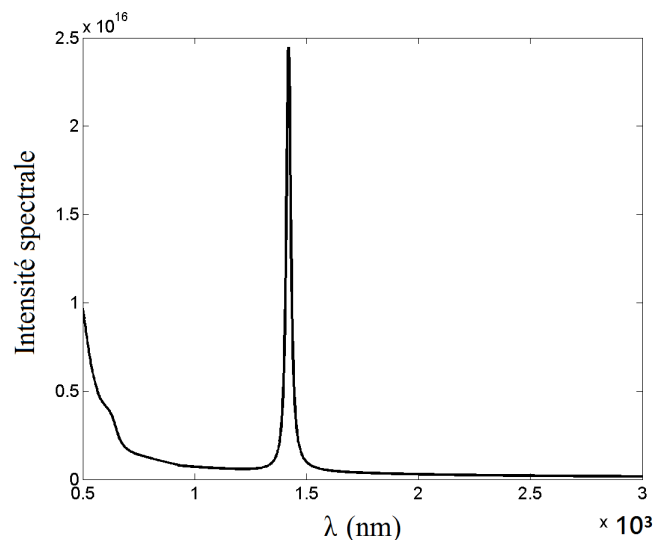


FIGURE 3.10 – Intensité spectrale au point  $\Gamma$  en fonction de la longueur d'onde de la structure perturbée à base de motifs en or.

### 3.4.3 Calcul de diffraction

Pour cette étude, nous avons éclairé la structure avec une onde polarisée TM et dont la forme temporelle correspond à une gaussienne s'étalant sur un intervalle compris entre 800 nm et 2000 nm. Les résultats de calcul de transmission et de réflexion sont illustrés sur la figure 3.11. Nous pouvons noter sur ces deux spectres la présence d'une discontinuité asymétrique au même endroit correspondant à  $\lambda = 1420$  nm. Sachant qu'à cet endroit on n'est pas en mesure d'exciter un plasmon de surface et on est loin des anomalies de Wood, alors cette discontinuité ne peut être due qu'à un couplage entre l'onde incidente et le mode du réseau présent à cet endroit correspondant à la résonance de Fano. Le spectre d'absorption calculé et représenté sur la figure 3.12 montre qu'une bonne partie de l'énergie incidente est utilisée pour l'excitation de ce mode Fano. Son facteur de qualité est estimé à  $Q = 55$ . Pour cartographier l'intensité du champ électromagnétique à la résonance, nous avons réalisé un autre calcul en excitant avec une onde monochromatique à la longueur d'onde 1420 nm. D'après la figure 3.13 rapportant l'intensité lumineuse à la résonance, le mode Fano excité est un mode d'air essentiellement confiné dans l'espace d'air réduit de la maille.

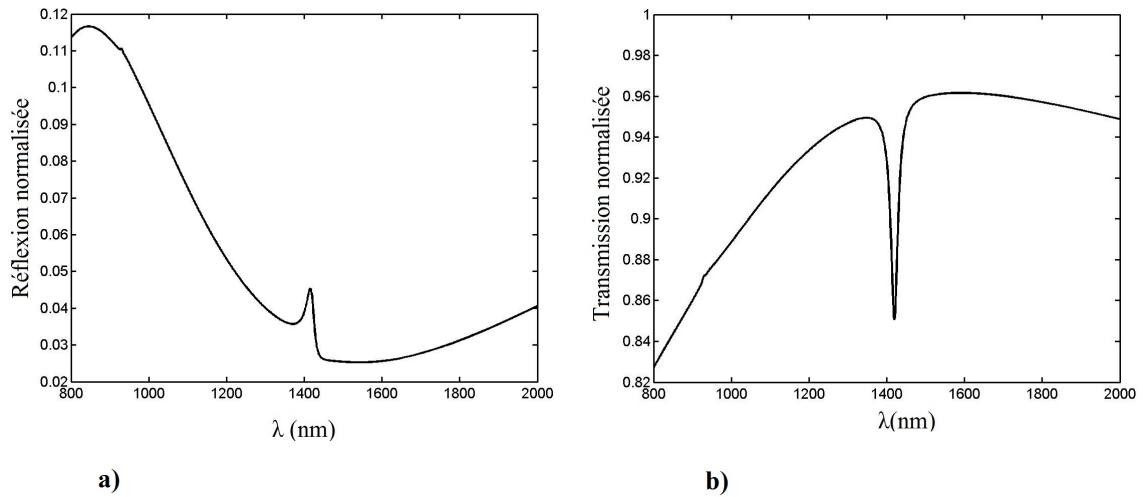


FIGURE 3.11 – Spectres de a) réflexion et b) transmission en fonction de la longueur d'onde.

Il est à noter que tous les modes de Bloch en  $\Gamma$  ne sont pas excités. En effet, les règles de sélections font qu'une onde plane en incidence normale, ne peut exciter les modes impairs [27].

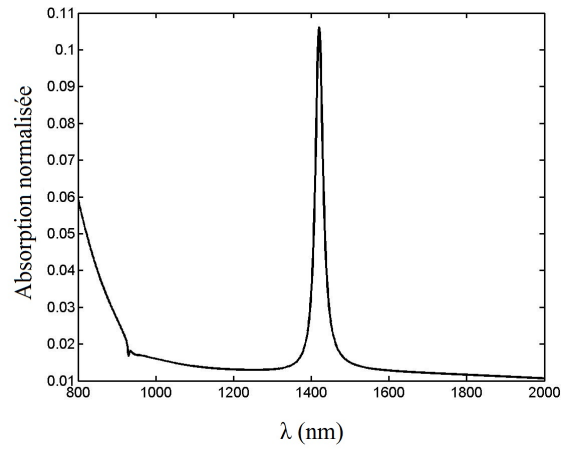


FIGURE 3.12 – Spectre d’absorption en fonction de la longueur d’onde.

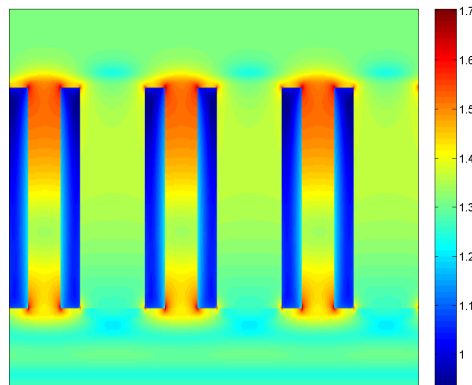


FIGURE 3.13 – Cartographie du champ à la résonance  $\lambda = 1420$  nm.

### 3.4.4 Effet de la nature du métal : cas de l’argent

Pour étudier l’effet de la nature du métal, nous avons repris l’étude précédente en considérant l’argent à la place de l’or. Le cristal photonique considéré présente les mêmes dimensions et est représenté sur la figure 3.14.

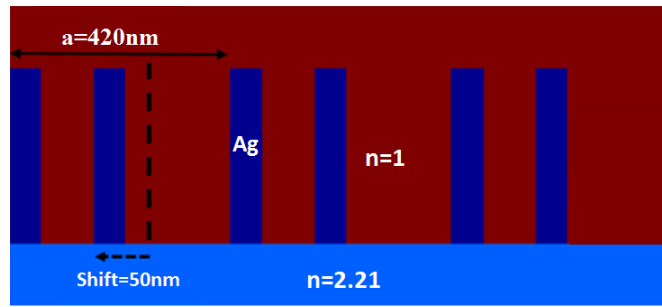


FIGURE 3.14 – Cristal photonique 1D de double période  $a=420$  nm. Le motif en argent est de largeur  $w=60$  nm et de hauteur  $h=350$  nm déposé sur un substrat de niobate de lithium  $n=2.21$ .

Comme précédemment, nous avons effectué un calcul de bande qui montre (Figure 3.15) la présence d'un mode propre aux alentours de 1420 nm. On remarque que ce pic est beaucoup plus fin que celui trouvé dans le cas de l'or. Les spectres de réflexion et de transmission, représentés sur la figure 3.16, présentent une discontinuité plus fine que celle observée dans le cas de l'or confirmant encore une fois que cette discontinuité est étroitement liée au couplage entre l'onde incidente et le mode de Bloch. Pour quantifier l'énergie utilisée pour l'excitation de ce mode de Fano, nous avons calculé l'absorption en fonction de la longueur d'onde (Figure 3.17). Comme on pouvait le prévoir, le pic d'absorption est localisé au même endroit ( $\lambda = 1420$  nm). L'intensité de ce pic d'absorption est beaucoup plus importante que celle obtenue dans le cas de l'or ce qui se traduit par un couplage plus important entre l'onde incidente et le mode de Bloch. Le facteur de qualité calculé est plus important et vaut 200.

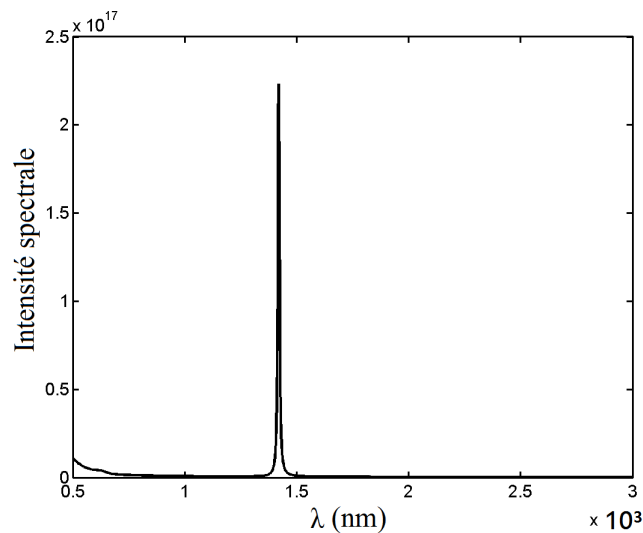


FIGURE 3.15 – Spectre de l'intensité spectral en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  calculé au point  $\Gamma$ .

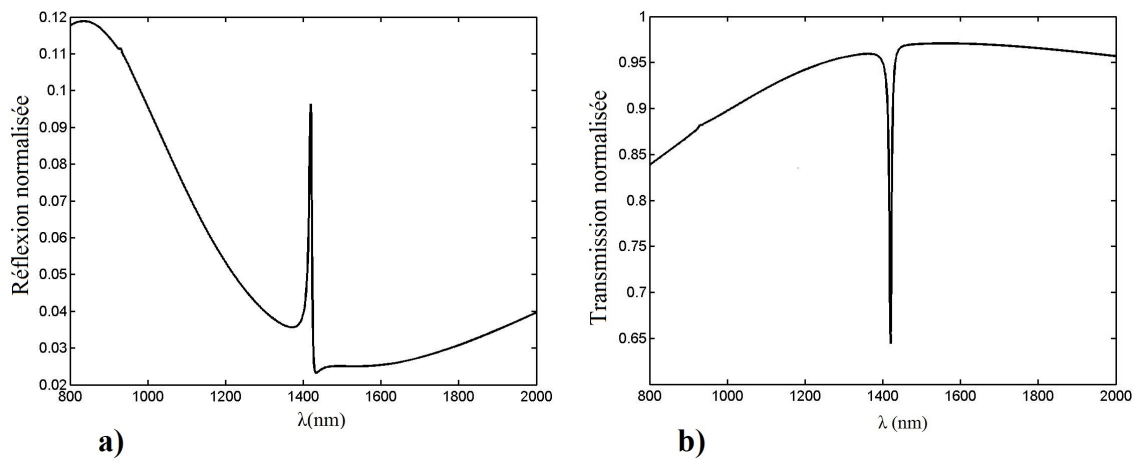


FIGURE 3.16 – Spectres de a) réflexion et b) transmission en fonction de la longueur d'onde

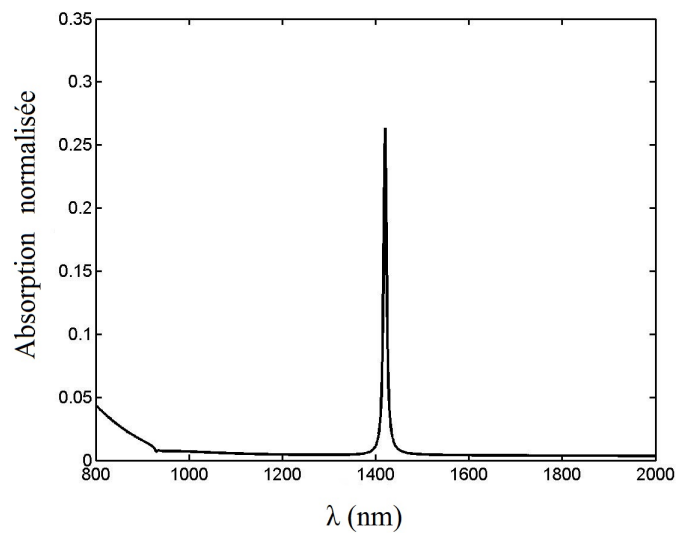


FIGURE 3.17 – Spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde.

## 3.5 Effets des paramètres géométriques

Pour améliorer le facteur de qualité de ces structures, nous avons effectué une étude paramétrique dans le but d'obtenir un facteur de qualité plus élevé.

En comparaison avec l'or, le fort couplage obtenu dans le cas de l'argent nous a amené à considérer ce dernier dans cette présente étude. Celle-ci a été menée en faisant varier les paramètres suivants : le déplacement (shift) et la hauteur.

### 3.5.1 Effet de la variation du shift

L'évolution du facteur de qualité en fonction du déplacement du deuxième motif est représentée sur la figure 3.18. On constate que le facteur de qualité est inversement proportionnel au shift avec une valeur maximale obtenue pour un déplacement de 15 nm. Les spectres de réflexion et d'absorption pour cette valeur optimale du shift sont représentés sur la figure 3.19.

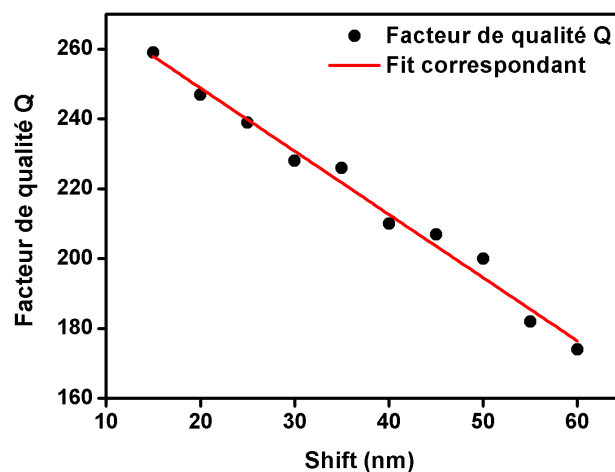


FIGURE 3.18 – Facteur de qualité en fonction du shift

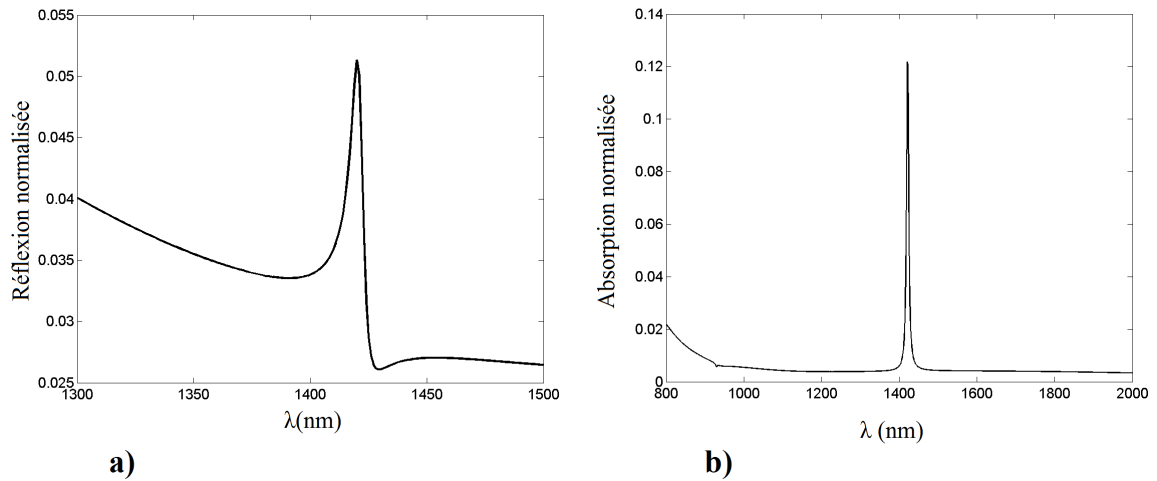


FIGURE 3.19 – Spectres de a) réflexion et b) d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour un shift de 15 nm.

### 3.5.2 Variation de la hauteur

Pour observer l'effet de la hauteur des motifs sur le facteur de qualité, nous avons choisi la valeur optimale du shift (15 nm) obtenue précédemment. L'évolution du facteur de qualité en fonction de la hauteur est représentée sur la figure 3.20. On constate que le facteur de qualité est inversement proportionnel à la hauteur sur la gamme d'étude

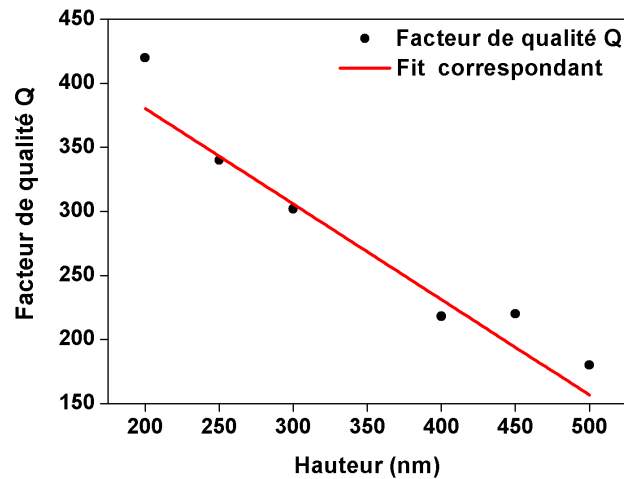


FIGURE 3.20 – Facteur de qualité en fonction de la hauteur

## 3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mené une étude FDTD d'excitation des résonances Fano dans les cristaux photoniques. Après avoir effectué un test de validation des codes de calcul utilisés, nous avons pu mettre en évidence par une approche double période l'excitation des modes de Bloch lents dans la structure considérée. La nature du métal utilisé a été prise en considération en comparant le cas de l'or au cas de l'argent. Les résultats obtenus ont montré que l'argent offre un meilleur couplage entre l'onde incidente et les modes de Bloch. En vue d'améliorer le facteur de qualité de ces résonances, nous avons fait varier certains paramètres géométriques de notre structure. Cette étude a mis en évidence la forte dépendance du facteur de qualité de la hauteur et du déplacement du motif.



# Conclusion générale

Ce travail est consacré à l'étude de l'excitation des résonances de Fano dans les cristaux photoniques métallo-diélectriques par la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD). Pour le mener à bien, nous l'avons subdivisé en trois chapitres.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les principales propriétés des cristaux photoniques où un accent particulier est mis sur les structures 1D, appelées également réseaux de Bragg. Les résonances de Fano correspondant au couplage d'un continuum incident avec un mode de Bloch discret sont décrites. L'analogie avec deux oscillateurs harmoniques couplés est exposée. Le chapitre se termine par la description de l'une des techniques les plus utilisées pour la fabrication des cristaux photoniques 1D.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation de la méthode FDTD utilisée dans le cadre de cette étude. Les équations de Maxwell discrétisées aux différences finies centrées selon le schéma explicite de Yee sont données. Les problèmes de dispersion et de stabilité inhérents à la technique FDTD sont discutés. Les conditions de Floquet-Bloch pour modéliser la périodicité du réseau de Bragg et celles aux frontières absorbantes (PML de Bérenger) pour décrire l'espace libre sont rapportées. Le chapitre se termine par la présentation d'un exemple de calcul de structure de bande photonique d'un réseau de Bragg.

Le dernier chapitre est consacré à l'étude par FDTD de l'excitation des résonances Fano dans les cristaux photoniques 1D dans la gamme optique. La dispersion des métaux nobles dans cette gamme est prise en compte via le modèle de Drude à deux points critiques. Le modèle utilisé a fait l'objet d'une validation par la reproduction des résultats de la littérature montrant l'excitation des modes de Bloch lents dans des structures photoniques diélectriques 1D.

Par la suite, nous avons simulé une structure métallo-diélectrique et où nous avons pu mettre en évidence par une approche double période l'excitation des résonances de Fano. L'effet de

la nature du métal sur le facteur de qualité de ces résonances est étudié en considérant l'argent et l'or. Les résultats obtenus ont montré que l'argent offre un meilleur couplage entre l'onde incidente et les modes de Bloch. Une étude paramétrique en fonction des paramètres géométriques de la structure est réalisée en vue d'aboutir à un meilleur facteur de qualité. Il a été démontré dans le cas de notre structure et sur la gamme de variation considérée, que le facteur de qualité est inversement proportionnel au déplacement du deuxième motif par rapport à sa position non perturbée.

En guise de perspective, nous comptons compléter cette étude paramétrique dans le cas 1D et l'élargir au cas des structures métallo-diélectriques bidimensionnelles.

# Bibliographie

- [1] U. Fano. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.*, 124 :1866–1878, Dec 1961.
- [2] S. Collin, G. Vincent, R. Haïdar, N. Bardou, S. Rommeluère, and J-L. Pelouard. Nearly perfect fano transmission resonances through nanoslits drilled in a metallic membrane. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :027401, Jan 2010.
- [3] F. Hao, Y. Sonnefraud, P.V. Dorpe, Stefan A. Maier, Naomi J. Halas, and P. Nordlander. Symmetry breaking in plasmonic nanocavities : Subradiant lspr sensing and a tunable fano resonance. *Nano Letters*, 8(11) :3983–3988, 2008.
- [4] N.A. Mirin, K. Bao, and P. Nordlander. Fano resonances in plasmonic nanoparticle aggregates. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113(16) :4028–4034, 2009.
- [5] V. A. Fedotov, M. Rose, S. L. Prosvirnin, N. Papasimakis, and N. I. Zheludev. Sharp trapped-mode resonances in planar metamaterials with a broken structural symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :147401, Oct 2007.
- [6] E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :2059–2062, May 1987.
- [7] S. John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :2486–2489, Jun 1987.
- [8] E. Yablonovitch. Photonic band-gap crystals. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 5(16) :2443, 1993.
- [9] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade. *Photonic crystals :Molding the Flow of Light*. Princeton University Press., second edition, 2008.
- [10] E. Yablonovitch and T. J. Gmitter. Photonic band structure : The face-centered-cubic case. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :1950–1953, Oct 1989.
- [11] A. Gascon. Fabrication et caractérisation de cristaux photoniques pour exaltation de fluorescence. Master’s thesis, Ecole Polytechnique, Montreal (Canada), 2011.
- [12] Y. Meunier, T. et El Abdellaoui. Cristaux photoniques colloïdaux. <http://physique.unice.fr/sem6/2013-2014/PagesWeb/PT/Cristaux/index.htm#section1>. Accessed : 2014.
- [13] H. Rigneault, J.-M. Lourtioz, C. Delalande, and A. Levenson. *La nanophotonique*. Hermes Lavoisier, 2005. ISBN 2-7462-1105-X.
- [14] A. Ueda and M. Eto. Resonant tunneling and fano resonance in quantum dots with electron-phonon interaction. *Phys. Rev. B*, 73 :235353, Jun 2006.
- [15] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :2257–2298, Aug 2010.
- [16] M. V. Rybin, A. B. Khanikaev, M. Inoue, K. B. Samusev, M. J. Steel, G. Yushin, and M. F. Limonov. Fano resonance between mie and bragg scattering in photonic crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :023901, Jul 2009.

- [17] W. Zhou, D. Zhao, Y.-C. Shuai, H. Yang, S. Chuwongin, A. Chadha, J.-H. Seo, K. X. Wang, V. Liu, Z. Ma, and S. Fan. Progress in 2D photonic crystal Fano resonance photonics. *Progress in Quantum Electronics*, 38 :1–74, January 2014.
- [18] B. Gallinet. *Fano Resonances in Plasmonic Nanostructures*. PhD thesis, STI, Lausanne, 2012.
- [19] W.E. Lamb and R.C. Retherford. Fine structure of the hydrogen atom. part ii. *Phys. Rev.*, 81 :222–232, Jan 1951.
- [20] Y. S. Joe, A. M. Satanin, and C. S. Kim. Classical analogy of fano resonances. *Physica Scripta*, 74 :259–266, 2006.
- [21] C. L. Garrido Alzar, M. A. G. Martinez, and P. Nussenzveig. Classical analog of electromagnetically induced transparency. *American Journal of Physics*, 70(1), 2002.
- [22] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 14(3) :302–307, May 1966.
- [23] A. Taflove and K.R. Umashankar. The finite-difference time-domain (fd-td) method for electromagnetic scattering and interaction problems. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 1(3) :243–267, 1987.
- [24] A. Belkhir. *Extension de la modélisation par FDTD en nano-optique*. Thèse de doctorat, Université de Franche-Comté, 2008.
- [25] J-P. Bérenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, 114(2) :185 – 200, 1994.
- [26] Z. KEBCI. Modélisation FDTD de nano-structures métalliques périodiques : Application à la structure AAA . Magister, Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou, November 2012.
- [27] E. Gerelli. *Nanopinces optiques à base de modes de Bloch lents en cavité*. PhD thesis, 2012. Thèse de doctorat Lyon, INSA 2012.
- [28] M. Hamidi, F.I. 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.