

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

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

MEMOIRE DE MASTER

FILIÈRE : PHYSIQUE
SPÉCIALITÉ : NANOPHYSIQUE

Présenté par :
Sidali Salim AGOURNAZ

Conception numérique d'un micro-détecteur de température à base de métamatériaux structurés en réseau de Niobate de Lithium.

Soutenu le 11/07/2023, devant le jury d'examen composé de :

<i>M.Djerdjer MITICHE</i>	Professeur	UMMTO	Président
<i>Aberrahmane BELKHIR</i>	Professeur	UMMTO	Rapporteur
<i>Abdelaziz MEZEGHRANE</i>	Professeur	UMMTO	Co-rapporteur
<i>Mahdi HAMIDI</i>	MCA	UMMTO	Examineur
<i>Hand ZENIA</i>	MCA	UMMTO	Examineur
<i>Macilia BRAIK</i>	MCB	UMMTO	Examineur

Remerciements

Il me sera très difficile de remercier tout le monde car c'est grâce à l'aide de nombreuses personnes que j'ai pu mener ce mémoire à son terme.

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMARI de Tizi-Ouzou. Je tiens à remercier le directeur A. MEZEGHRANE, Professeur à l'UMMTO, pour son effort constant à rendre l'endroit meilleur. Je le remercie, également, pour avoir co-encadré ce mémoire ainsi que pour son aide précieuse et indispensable.

Je n'oublierai pas d'exprimer ma gratitude à monsieur M. HAMIDI, Maître de Conférence A à l'UMMTO, à monsieur H. ZENIA, Maître de Conférence A à l'UMMTO, et à madame M. BRAIK, Maître de conférences B à l'UMMTO, de me faire l'honneur d'examiner ce travail en tant que membre du jury.

Je tiens à remercier monsieur A. BELKHIR, Professeur à l'UMMTO, qui m'a encadré tout au long de ce mémoire. Je le remercie pour sa confiance, sa disponibilité permanente, ses précieux enseignements et pour les nombreux encouragements qu'il m'a prodigués.

Je tiens aussi à remercier monsieur M.D MITICHE, Professeur à l'UMMTO, de me faire l'honneur d'être président du jury .

J'exprime ma reconnaissance et ma gratitude à tous les enseignants ayant contribué à ma formation.

A mes camarades et amis du LPCQ et particulièrement DJEMAI Lylia dont l'aide et les conseils ont été indispensables à la réalisation de ce travail.

Résumé

Dans ce travail nous avons étudié par FDTD la sensibilité d'un cristal photonique 1D à la variation de la température ambiante. Pour se faire, nous avons exploité les propriétés électro-optiques du Niobate de Lithium (LiNbO_3), utilisé comme milieu environnant, et les modes de Bloch lents de type Fano supportés par un réseau 1D en argent. La sensibilité à la température se traduit par le décalage de la longueur d'onde de la résonance Fano, observé sur les spectres de transmission. Pour que la structure conçue soit compatible avec l'optique intégrée, nous avons considéré un réseau fini en faisant varier le nombre de périodes. Nos résultats de simulation montrent que le détecteur préserve une bonne sensibilité avec seulement une vingtaine de périodes comparativement au cas infini.

Table des matières

Introduction générale	6
1 Généralités	7
1.1 cristaux photoniques	7
1.2 Propriétés du Niobate de Lithium	8
1.3 Effet électro-optique linéaire ou effet Pockels	8
1.4 Effet pyroélectrique	8
1.5 Résonance Fano	9
2 Principes de la méthode FDTD	11
2.1 Introduction	11
2.2 Principe de la méthode FDTD	11
2.3 Les équations de base	12
2.4 Discrétisation spatio-temporelle et stabilité	13
2.5 Conditions aux limites spatiales	14
2.5.1 Couches d'absorption aux frontières de type PML	14
2.5.2 Conditions aux limites périodiques	15
2.6 Conclusion	15
3 Étude de la sensibilité à la température de la résonance Fano supportée par des réseaux 1D	16
3.1 Introduction	16
3.2 Cas d'une structure infinie	16
3.2.1 Étude de la structure "double période"	16
3.2.2 Cartographies du champ électrique	18
3.2.3 Calcul des effets pyroélectrique et électro-optique	18
3.3 Première approche	18
3.3.1 Deuxième approche	20
3.4 Cas de structures finies	22
3.4.1 Structure comportant 100 périodes	22
3.4.2 Structure comportant 50 périodes	24
3.4.3 Structure comportant 20 périodes	26
3.5 Conclusion	29
Conclusion générale	31

Table des figures

1.1	Représentation d'un cristal photonique à une dimension.	7
1.2	Structure cristalline du $LiNbO_3$	9
1.3	Profil asymétrique de la résonance Fano en fonction de facteur asymétrique q . [12]	10
2.1	Schéma représentant la boucle de l'algorithme FDTD.	12
2.2	Céllule élémentaire de Yee.	13
2.3	Représentation d'une fenêtre de calcul FDTD avec les conditions PML et PBC [16].	14
2.4	Représentation d'une fenêtre de calcul FDTD 2D délimitée par des PML uniquement[16].	15
3.1	structure métallo-diélectrique composé d'un CP 1D	17
3.2	Spectre de transmission normalisé pour la structure non perturbée	17
3.3	Structure à CP 1D de période $2a$, immergée dans le substrat de LN	19
3.4	Spectre de transmission obtenu pour la structure CP 1D de période $2a$	19
3.5	Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique et vecteurs de poynting au pic de résonance	20
3.6	Spectre de transmission normalisée centré autour de la résonance Fano pour différentes températures "première approche".	21
3.7	Structure "double période" après la prise en compte du changement d'indice par la deuxième approche.	21
3.8	Spectre de transmission normalisée centré autour de la résonance Fano pour différentes températures "deuxième approche".	22
3.9	Spectre de transmission normalisée pour la structure 100 périodes.	23
3.10	Cartographie de la distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 100 périodes.	23
3.11	Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 100 périodes.	24
3.12	Spectre de transmission normalisée pour la structure 50 périodes.	25
3.13	Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 50 périodes.	25
3.14	Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 50 périodes.	26
3.15	Spectre de transmission normalisée pour la structure 20 périodes.	27
3.16	Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 20 périodes.	27
3.17	Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance au bord de la structure de 20 périodes.	28

3.18 Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance au centre de la structure de 20 périodes. 28

3.19 Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 20 périodes. 29

Introduction générale

Depuis 1987, année de parution de deux articles majeurs de Eli Yablanovich [1] et Sajeev John [2] où ils prévoyaient la possibilité de produire des structures à deux ou trois dimensions, appelées cristaux photoniques, qui posséderaient des bandes interdites photoniques, un intense engouement de la communauté scientifique de par le monde est suscité en raison de son potentiel d'applications très large. Dès lors des progrès et des avancées n'ont cessé d'être enregistrés, permettant ainsi d'élargir le champ d'application de ces structures.

Le champ d'application actuel des cristaux photoniques s'étend sur plusieurs domaines tels que l'optique (Miroirs omnidirectionnels à haute réflectivité), les télécommunications (Guides d'ondes à faibles pertes, filtres optiques...)[3] , etc. De nouvelles structures sont constamment développées, offrant des perspectives très prometteuses en vue de concevoir des capteurs plus sensibles à la détection et qui suscitent une demande croissante dans plusieurs domaines.

L'objectif de ce travail est de concevoir un micro-détecteur de température ultra miniaturisé, compatible avec les composants de l'optique intégrée et non disruptif. Ce détecteur est basé sur la sensibilité à la variation d'indice et conçu à base d'une structure possédant une résonance particulière dont la position spectrale dépend fortement de l'indice du milieu environnant. Pour cela, nous utilisons la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) qui offre de nombreux avantages en terme de moyens et de temps.

Ce manuscrit est structuré en trois chapitres :

Dans le premier chapitre, nous rappelons quelques propriétés des cristaux photoniques[4] et du Niobate de Lithium [5], qui est un matériau très remarquable en raison de ses différentes propriétés, notamment la pyroélectricité et la piézoélectricité.

Dans le deuxième chapitre nous dressons un rappel succinct de la méthode FDTD, qui représente un outil de choix pour la simulation d'expériences en photonique en raison notamment de son caractère large bande.

Le troisième chapitre est consacré à la présentation et la discussion des résultats obtenus.

Ce manuscrit se termine par une conclusion générale rappelant les principaux résultats obtenus et donnant aussi quelques perspectives au travail réalisé.

Chapitre 1

Généralités

1.1 cristaux photoniques

Les cristaux photoniques sont des structures périodiques de matériaux diélectriques, semi-conducteurs ou métallo-diélectriques modifiant la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière qu'un potentiel périodique dans un semi-conducteur affecte le déplacement des électrons en créant des bandes d'énergie autorisées et interdites[6]. Les longueurs d'onde pouvant se propager dans un cristal photonique se nomment les modes propres et la représentation énergie-vecteur d'onde correspondante forme la structure de bandes du cristal photonique considéré. La plage de fréquences ou de longueurs d'onde dépourvue de modes propagatifs est qualifiée de bande interdite photonique (photonic band gap en anglais).

- La forme la plus simple d'un cristal photonique est une structure périodique à une dimension composée d'un empilement multicouche également appelé " réseau de Bragg ". On l'assimile à un cristal photonique unidimensionnel, car les propriétés spécifiques au cristal photonique (variation de la constante diélectrique) n'existent que dans une seule dimension (voir figure 1.1).
- Un cristal photonique bidimensionnel est un milieu dont la constante diélectrique varie périodiquement suivant deux dimensions. Généralement, ce sont des couches planes d'épaisseur finie et d'indice donné sur lesquelles sont gravés des motifs, d'indice différents, de manière périodique dans le plan transversal.



FIGURE 1.1 – Représentation d'un cristal photonique à une dimension.

1.2 Propriétés du Niobate de Lithium

Nous ne rappelons dans cette sections que quelques propriétés remarquables du Niobate de Lithium ($LiNbO_3$). Plus de détails sont donnés dans le mémoire de Master de M. Braik [7]. Le $LiNbO_3$ est élaboré artificiellement à partir des éléments chimiques suivants : le niobium, le lithium et l'oxygène. C'est un matériau diélectrique solide, anisotrope, transparent pour des longueurs d'onde comprises entre $350nm$ et $5500nm$, de structure cristalline trigonale (figure 1.2) et de groupe ponctuel de symétrie $3m$. Cette classe de symétrie est non centro-symétrique, i.e. : absence de centre d'inversion, ce qui confère au matériau d'importantes propriétés tels que les effets électro-optiques (EO) linéaires ou non. L'opportunité récente de l'usiner en couches minces et en nanostructures a élargi le spectre des applications déjà nombreuses de ce matériau.

propriétés générales : [8]

point de fusion : 1260 °C

symétrie : trigonal, groupe $3m$

ferroélectricité : température de Curie $T_C = 1150\text{ °C}$

piézoélectrique

pyroélectrique

propriétés optiques :

région de transparence : $350nm \rightarrow 5\text{ }\mu m$

anisotropie : uniaxial

indice de réfraction : $n_o = 2.286$, $n_e = 2.203$ (à $632.8nm$) [5]

Où n_o et n_e représentent respectivement l'indice de réfraction ordinaire et extraordinaire du Niobate de Lithium.

1.3 Effet électro-optique linéaire ou effet Pockels

L'effet EO linéaire correspond à la modification de la propagation d'une onde électromagnétique dans un matériau [9]. Cette modification est due à la présence d'un champ électrique statique ou lentement variable (basse fréquence). Physiquement, cela correspond à l'apparition d'une biréfringence dans un milieu où sa modification et qui est proportionnelle au champ électrique appliqué ou induit. L'effet Pockels apparaît uniquement dans les cristaux sans symétrie par rapport à un axe, comme le Niobate de lithium ou l'arséniure de gallium.

Les variations induites sur les indices ordinaire et extraordinaire sont données par :

$$\Delta n_o = -\frac{1}{2}n_o^3 r_{13} E_z \quad (1.1)$$

$$\Delta n_e = -\frac{1}{2}n_e^3 r_{33} E_z \quad (1.2)$$

r_{11} et r_{33} étant les seuls coefficients du tenseur électro-optique que nous aurons à utiliser, et E_z le champ appliqué (ou induit) parallèlement à l'axe optique Oz .

1.4 Effet pyroélectrique

Le niobate de lithium est un cristal ferroélectrique, i.e. possède une polarisation spontanée en l'absence d'un champ électrique externe. Comme tous les matériaux ferroélectriques, le

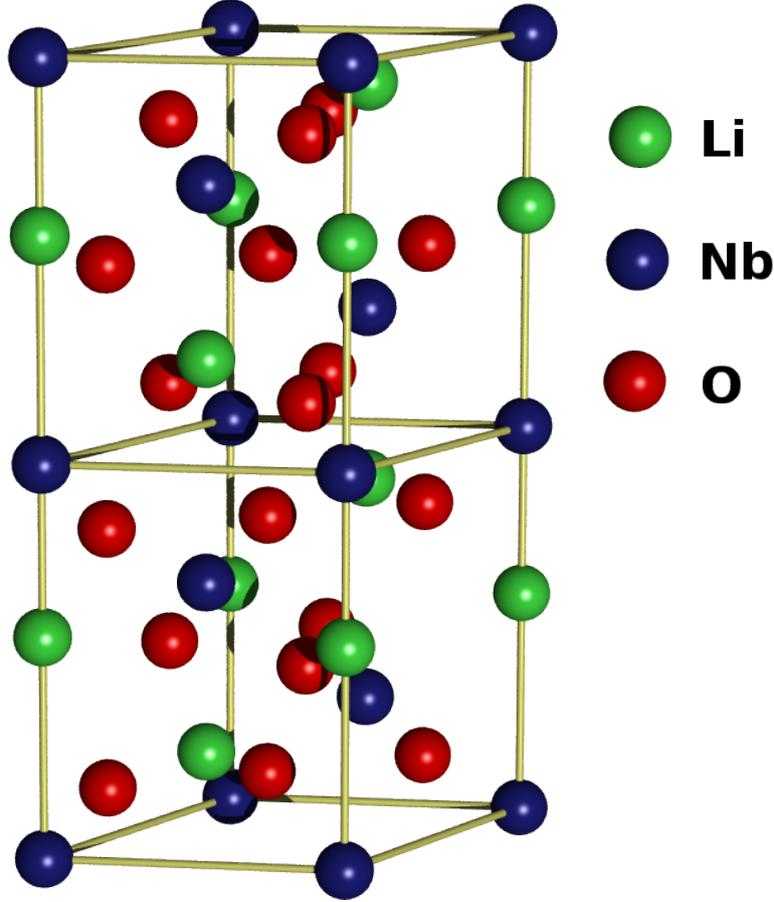


FIGURE 1.2 – Structure cristalline du $LiNbO_3$.

niobate de lithium est pyroélectrique. Il subit un changement de sa polarisation spontanée lorsqu'il est soumis à une variation de température. L'effet pyroélectrique ne doit pas être confondu avec l'effet thermoélectrique, où un gradient de température fixé donne naissance à une tension permanente [10].

Dans le cas du $LiNbO_3$, la variation de sa température induit un déplacement relatif des atomes de Lithium et de Niobium par rapport à la couche d'oxygène, ce qui modifie la polarisation spontanée. Le coefficient pyroélectrique P est défini comme :

$$P = \frac{\partial p_s}{\partial T} \quad (1.3)$$

La variation de température dans le Niobate induit un champ pyroélectrique noté E_{pyr} tel que :

$$E_{pyr} = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} P \Delta T \quad (1.4)$$

où ϵ_0 et ϵ_r correspondent respectivement à la permittivité diélectrique du vide et à la composante zz du tenseur diélectrique du $LiNbO_3$. ΔT représente la variation de température par rapport à la température de référence (20 °C) et P le coefficient pyroélectrique caractérisant le $LiNbO_3$ et ayant comme valeur $P = -6 * 10^{-5} Cm^{-2}K^{-1}$

1.5 Résonance Fano

L'effet Fano, ou résonance Fano, désigne de manière générale les interférences quantiques entre deux phénomènes physiques dans un milieu, où l'un a un spectre discret en énergie et

l'autre un spectre continu[11].

L'effet Fano est aussi rencontré dans les spectres de transmission et de réflexion optique pour un certain nombre de structures tel que les cristaux photoniques.

La forme du profil de résonance dépend de l'interaction entre l'état discret et le continuum et est décrite par la formule suivante :

$$\sigma = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} \quad (1.5)$$

ϵ représente l'énergie réduite, q le paramètre asymétrique et σ la section efficace d'absorption. Nous pouvons ainsi observer la dépendance entre σ et le paramètre asymétrique q sur la figure ci-dessous

Pour la structure que nous avons étudiée, la résonance Fano se manifeste par l'apparition d'un deep asymétrique sur les spectres de transmission.

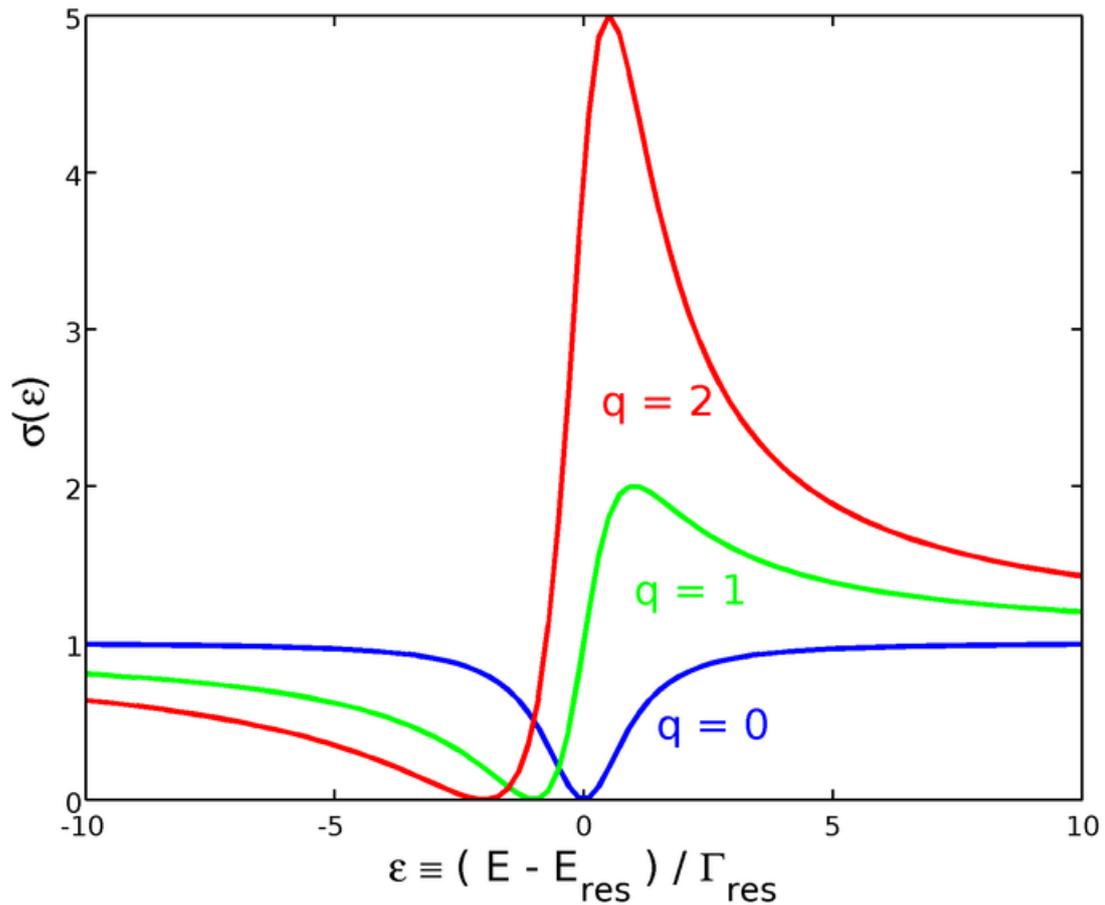


FIGURE 1.3 – Profil asymétrique de la résonance Fano en fonction de facteur asymétrique q . [12]

Chapitre 2

Principes de la méthode FDTD

2.1 Introduction

Le recours systématique aux méthodes expérimentales pour étudier et concevoir des structures à base de cristaux photoniques (1D, 2D ou 3D) est loin d'être une solution optimale et ce pour plusieurs raisons, entre autres le coût, les moyens nécessaires à la fabrication de telles structures, etc. De plus, la compréhension de la propagation des ondes électromagnétiques dans ces matériaux, qui est de première importance, nécessite souvent la résolution des équations de Maxwell en faisant appel aux méthodes numériques telle que la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) utilisée dans ce travail. Les outils numériques de modélisation permettent ainsi de compléter ces expériences souvent coûteuse et difficiles à mettre en oeuvre.

2.2 Principe de la méthode FDTD

La méthode FDTD (Finite-Difference Time-Domain), basée sur le schéma de Yee[13], est un outil rigoureux et puissant, très adapté pour la modélisation de dispositifs optiques à l'échelle nanométrique. Cette méthode est basée sur la résolution directe des équations de Maxwell sans aucune approximation physique. Elle résout les équations de Maxwell dans un espace discret en calculant le champ électromagnétique en des points de grille espacés de Δx , Δy et Δz . La FDTD permet de calculer la diffusion, la transmission, la réflexion, l'absorption, etc. C'est une méthode temporelle ; un seul calcul permet de remonter à la réponse spectrale de la structure via une simple transformée de Fourier (FFT).

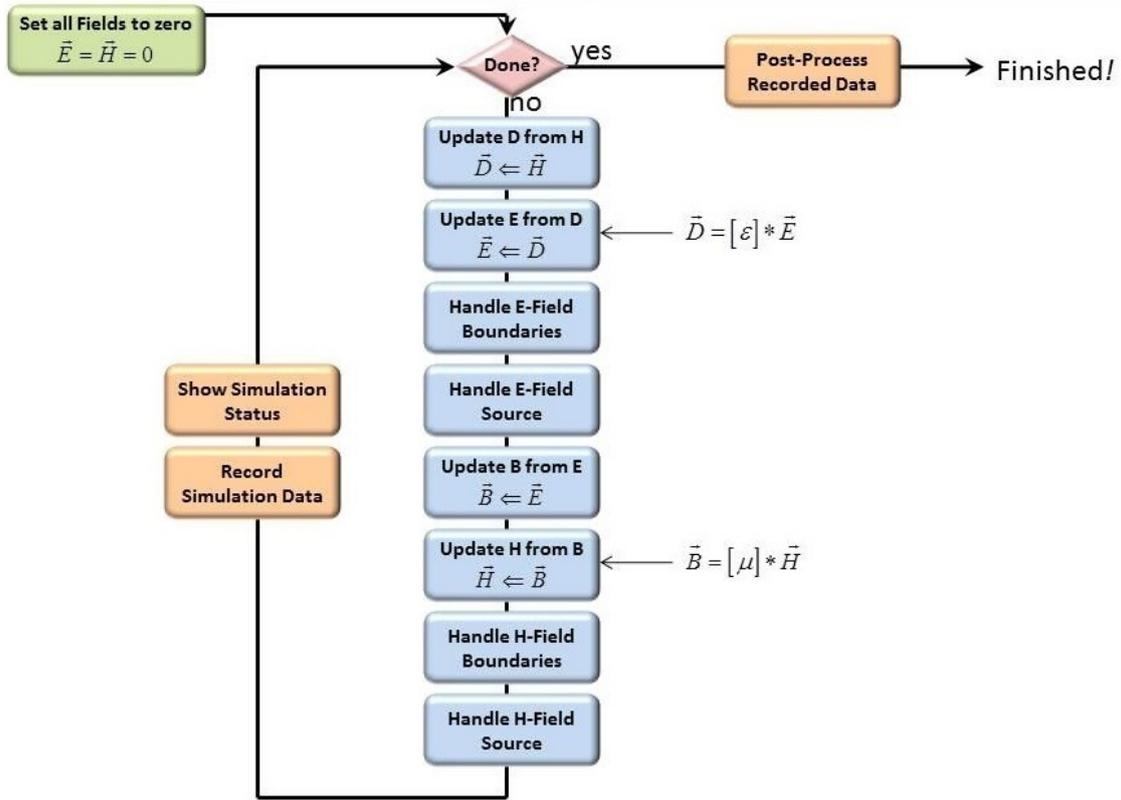


FIGURE 2.1 – Schéma représentant la boucle de l’algorithme FDTD.

2.3 Les équations de base

Comme énoncé précédemment la méthode FDTD consiste à résoudre les équations de Maxwell dans un espace discrétisé en cellules élémentaires. Les deux équations de Maxwell considérées s’écrivent comme suit :

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

$$\overrightarrow{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \quad (2.2)$$

A ces deux équations il est nécessaire d’ajouter les relations constitutives qui caractérisent un milieu donné.

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.3)$$

$$\vec{E} = \epsilon \vec{D} \quad (2.4)$$

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r \quad (2.5)$$

ϵ représente la permittivité absolue, ϵ_0 la permittivité du vide, ϵ_r la permittivité relative du milieu considéré et μ la perméabilité magnétique du milieu considéré.

Pour mieux comprendre le déroulement d’un calcul FDTD, nous allons illustrer son algorithme sur un problème unidimensionnel.

Pour une onde plane se propageant selon l’axe Oz , les équations de Maxwell peuvent être reformulées de la façon suivante :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (2.7)$$

Le schéma de Yee (voir figure 2.2) consiste à calculer E_x et H_y avec un décalage d'un demi-pas dans l'espace et dans le temps. Les équations (2.6) et (2.7) deviennent :

$$\frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) - E_x^{n-\frac{1}{2}}(k)}{\Delta t} = -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{H_y^n(k+\frac{1}{2}) - H_y^n(k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \quad (2.8)$$

$$\frac{H_y^{n+1}(k+\frac{1}{2}) - H_y^n(k+\frac{1}{2})}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(k+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k)}{\Delta z} \quad (2.9)$$

Comme on peut le constater sur les équations (2.8) et (2.9), le schéma de Yee est entièrement explicite et ne nécessite donc aucune inversion de matrice pour le calcul des différentes composantes du champ électromagnétique.

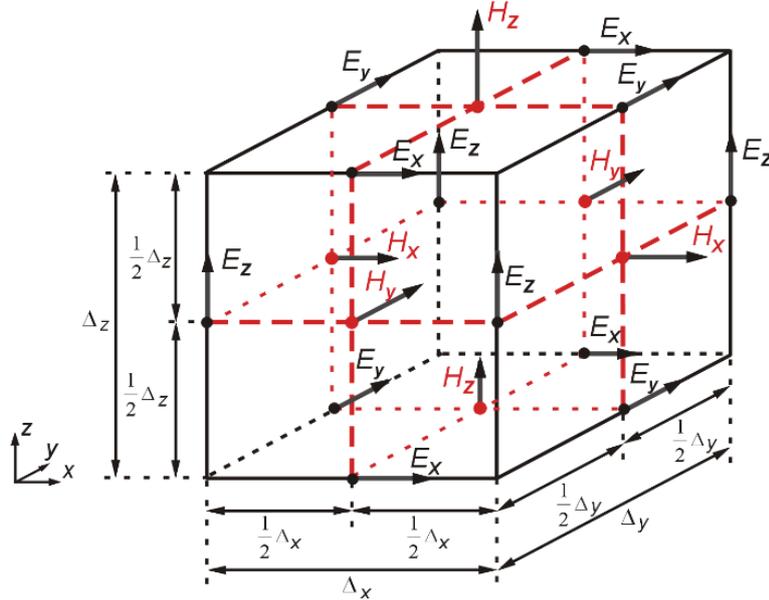


FIGURE 2.2 – Cellule élémentaire de Yee.

2.4 Discrétisation spatio-temporelle et stabilité

Se pose maintenant la question du choix des pas de discrétisation temporelle Δt et spatiale (Δx , Δy et Δz).

Étant donné que les OEM se propagent dans un espace discret, cela entraîne une dispersion non-physique due au fait que les signaux numériques se propagent au cours du temps, dans le domaine de calcul avec une vitesse de phase différente de la vitesse réelle ce qui engendre un déphasage par rapport à l'onde réelle. Pour remédier à ce problème il est impératif de choisir un pas de discrétisation spatial adéquat et vérifiant la relation suivante (voir la thèse de Doctorat de M. Hamidi pour plus de détails) :

$$\max(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{\min}}{20} \quad (2.10)$$

En prenant cette condition pour le choix du pas de discrétisation spatiale, l'erreur maximale commise sur la vitesse de phase est de l'ordre de 0.3% [14].

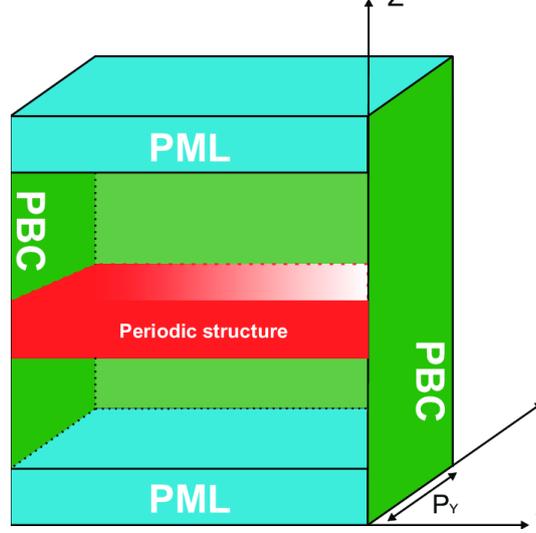


FIGURE 2.3 – Représentation d’une fenêtre de calcul FDTD avec les conditions PML et PBC [16].

Il est aussi possible d’utiliser un maillage spatial non-uniforme dans un but d’augmenter la précision des calculs sans engendrer d’augmentation significative du temps de calcul, tout en s’assurant que la condition (2.9) soit respectée.

Dans ce travail il est à noter que le pas maximum pris est de l’ordre de $\frac{\lambda_{min}}{40}$.

Une fois le pas de discrétisation spatial déterminé, vient le pas de discrétisation temporel et pour des raisons de stabilité numérique les composantes du champ ne peuvent se propager sur plus d’une cellule spatiale pendant un pas temporel Δt . Le pas temporel Δt doit respecter le critère suivant :

$$\Delta t \leq \frac{1}{c_0 \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.11)$$

tel que c_0 représente la vitesse de la lumière dans le vide.

2.5 Conditions aux limites spatiales

2.5.1 Couches d’absorption aux frontières de type PML

Une PML (perfectly matched layer) [15] est une couche absorbante artificielle couramment utilisée pour tronquer les régions de calcul dans les méthodes numériques afin de simuler des problèmes avec des frontières ouvertes, en particulier dans le cas de la FDTD. La principale propriété d’une PML est sa capacité à d’absorber toute onde propagative arrivant en incidence quelconque. Cette propriété permet à la PML d’absorber fortement les ondes sortantes de l’intérieur d’une région de calcul sans les réfléchir à l’intérieur. Cette propriété provient de la condition d’adaptation d’impédance à l’interface de deux milieux de même indice et où l’un est absorbant. L’adaptation d’impédance se fait selon l’équation ci-dessous :

$$\frac{\sigma^m}{\mu} = \frac{\sigma^e}{\epsilon} \quad (2.12)$$

σ^m et σ^e représentent respectivement la conductivité magnétique et électrique des PML.

2.5.2 Conditions aux limites périodiques

Un autre type de conditions aux limites que nous avons utilisé dans ce travail est les conditions aux limites périodiques (CLP) issues du théorème de Bloch. Elles permettent de modéliser une structure périodique en ne considérant qu'une seule maille élémentaire dans la fenêtre de calcul FDTD. La combinaison de ces de deux conditions (PML) et (CLP) permet entre autre de modéliser des structures finies suivant une direction et infiniment périodiques suivant une autre.

Dans cette étude nous utilisons dans un premier cas une combinaison de PML suivant l'axe z et CLP suivant l'axe x et dans un deuxième cas la grille 2D est délimitée par des PML uniquement.

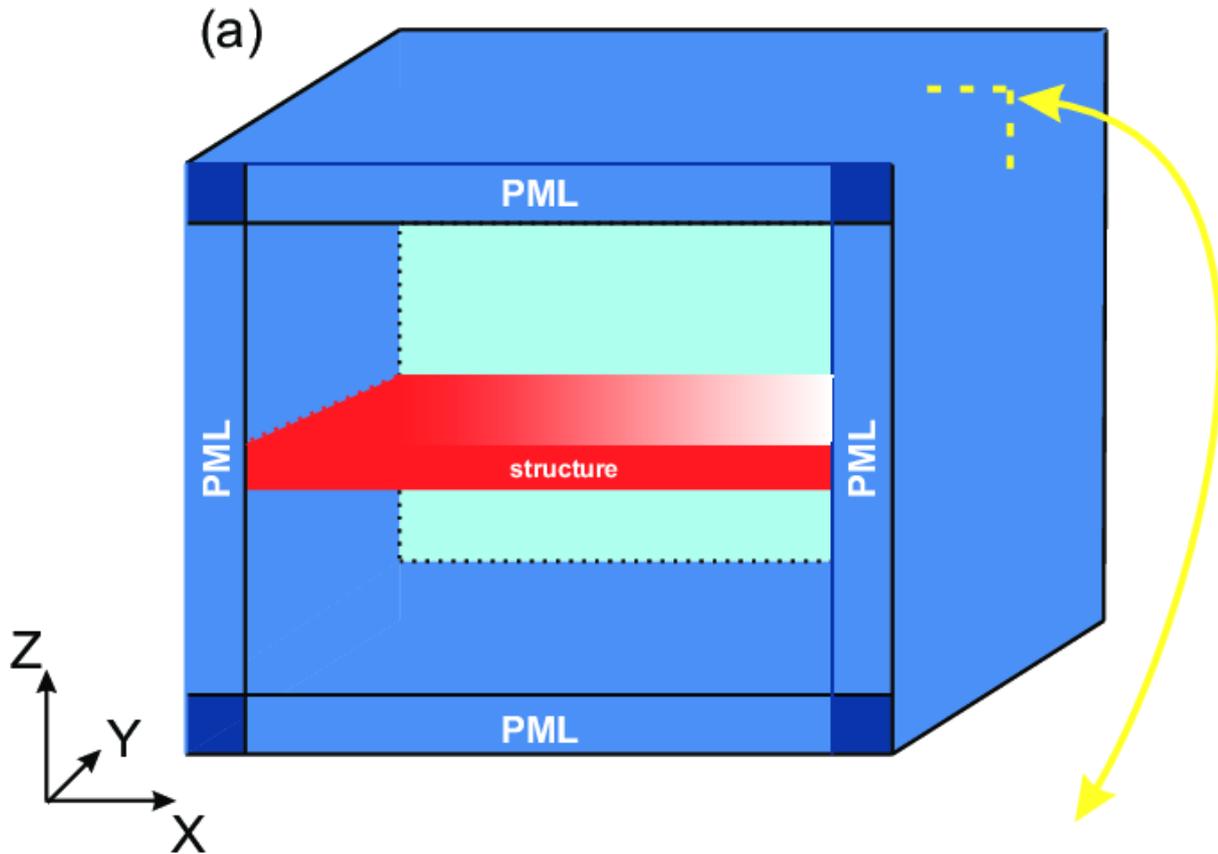


FIGURE 2.4 – Représentation d'une fenêtre de calcul FDTD 2D délimitée par des PML uniquement[16].

2.6 Conclusion

La méthode FDTD est un outil de simulation très performant et très adéquat pour l'étude de structures périodiques ou apériodique. Il est aussi possible de prendre en compte la nature dispersive des différents milieux. Cette méthode permet entre autre de connaître la réponse spectrale (transmission et réflexion) des structures étudiées, les structures de bande ainsi que la répartition spatiale du champ électromagnétique.

Chapitre 3

Étude de la sensibilité à la température de la résonance Fano supportée par des réseaux 1D

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons étudier la sensibilité à la température des structures métallo-diélectriques périodiques 1D réalistes (finies). Cette étude est le prolongement du travail réalisé par M. Braik dans le cadre de son mémoire de Master [7] où des réseaux infiniment périodiques sont considérés. Ces derniers supportent des modes de Bloch lents de type Fano dont la longueur d'onde de résonance est très sensible à la température ambiante. L'excitation de ces modes est rendue possible grâce à l'approche double période. L'effet de la température est pris en compte à travers les effets pyro- et électro- optiques du Niobate de Lithium. Sachant que les structures réalistes sont finies, nous avons donc étudié l'effet du nombre de périodes constituant le réseau sur la sensibilité à la température.

3.2 Cas d'une structure infinie

Pour mener à bien cette étude et pour les besoins de comparaison, nous avons jugé utile de reprendre le cas parfait d'un réseau 1D (infini). La structure est composée de piliers d'argent de hauteur $350nm$ et de largeur $60nm$ disposés selon un réseau périodique de période $a = 210nm$. Les piliers d'argent sont incrustés dans le Niobate de Lithium.

Sur la figure 3.1, nous avons représenté la structure étudiée dans ce premier cas ; l'air étant représenté en jaune et le substrat de Niobate de Lithium en bleu clair.

Il est aussi à noter que pour toutes les structures étudiées la source se trouve dans l'air et la détection se fait dans le Niobate de Lithium.

La figure 3.2 représente le spectre de transmission normalisée de la structure parfaite de la figure 3.1. Ce spectre n'exhibe aucune discontinuité, ce qui signifie qu'aucun mode particulier n'est excité dans ce cas. Notons que ces résultats sont identiques à ceux obtenus dans [7].

3.2.1 Étude de la structure "double période"

Une étude modale sur la structure de la figure 3.1 a été menée [7] et a montré l'existence d'un mode de Bloch lent au point X de la première zone de Brillouin. Ce mode particulier

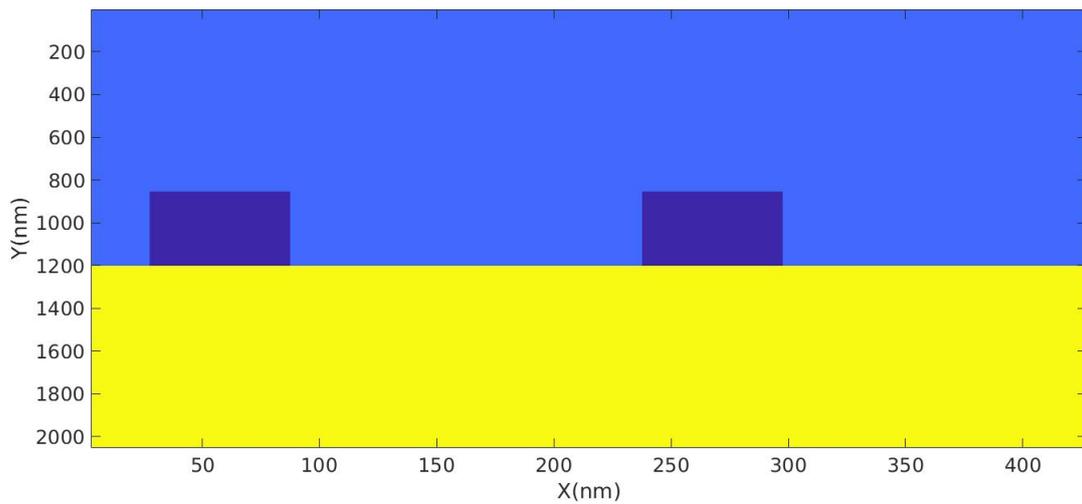


FIGURE 3.1 – structure métal-diélectrique composé d'un CP 1D

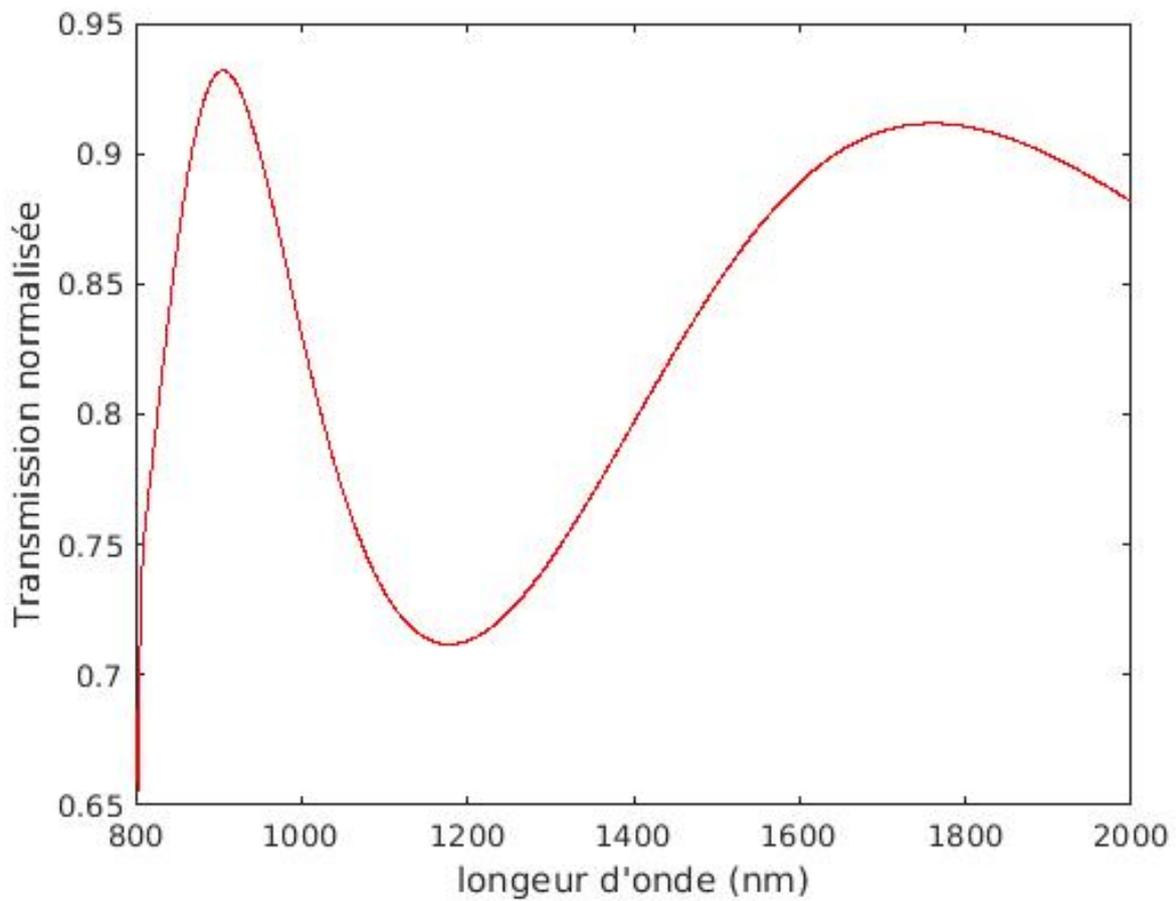


FIGURE 3.2 – Spectre de transmission normalisé pour la structure non perturbée

dont la vitesse de groupe tend vers zéro, se trouve sous la ligne de lumière et ne peut donc être excitée par une onde plane incidente.

L'approche double période qui consiste à décaler légèrement un pilier sur deux afin de doubler la période de la structure, qui devient égale à $2a = 420\text{nm}$, permet de provoquer un repliement

de bande et donc de ramener ce mode propre du point X au point Γ pour qu'il soit excitable en incidence normale. La nouvelle structure de période $2a$ est représenté sur la figure 3.3.

Le calcul de transmission, effectué sur cette structure double période, est représenté sur la figure 3.4. Nous constatons la présence d'un dip à profil asymétrique à 1091nm , typique des résonances Fano.

3.2.2 Cartographies du champ électrique

Un calcul permanent est effectué par un code FDTD en fixant la longueur d'onde λ à 1091nm afin de visualiser la répartition de l'intensité électrique dans notre structure. Les résultats obtenus, portés sur la figure 3.5, montrent un fort confinement du champ électrique dans le CP 1D, et plus précisément dans le niobate de lithium où nous voulons exalter l'effet électro-optique. Cette cartographie nous permet de distinguer trois régions où le champ est particulièrement intense dans le $LiNbO_3$: la première étant la petite cavité, région de 100nm de largeur délimitée par deux piliers d'argent, la deuxième étant la grande cavité qui est aussi délimitée par deux piliers d'argent mais plus large que la première cavité (200nm), et la troisième correspond aux bas des piliers d'argent.

3.2.3 Calcul des effets pyroélectrique et électro-optique

Dans le $LiNbO_3$, la variation de température induit un champ électrique dit pyroélectrique donné par :

$$E_z = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} P \Delta T \quad (3.1)$$

Le champ pyroélectrique induit va à son tour induire un changement d'indice du $LiNbO_3$ (l'effet électro-optique) que l'on retrouve ci-dessous[17] :

$$\Delta n = -\frac{1}{2} n_e^3 f_{opt}^2 r_{33} E_z \quad (3.2)$$

Où $n_e = 2.14$ est l'indice de réfraction extraordinaire, $r_{33} = 32\text{pm}/v$ [18], f_{opt} étant le facteur optique qui quantifie le confinement du champ électrique et qui se calcule comme suit [17] :

$$f_{opt} = \frac{\int \int_{CP} |E(x, z)| dx dz}{\int \int_{bulk} |E(x, z)| dx dz} \quad (3.3)$$

L'équation (3.3) représente le rapport des intégrales de l'amplitude du champ électrique sur toute la surface de la structure incluant le cristal photonique sur celle évaluée sur la même surface en l'absence des piliers en Argent.

$\epsilon_r = 28.7$, ϵ_0 étant la permittivité du vide et $P = 10^{-5} \text{Cm}^{-2} \text{K}^{-1}$ le facteur pyroélectrique.

Dans ce qui suit nous allons calculer le facteur f_{opt} en utilisant deux approches différentes. La première, utilisée dans [7], consiste à calculer un f_{opt} moyen pour chacune des trois régions présentant un fort confinement du champ électrique. La seconde consiste à calculer localement le f_{opt} pour chaque cellule élémentaire de la grille FDTD.

3.3 Première approche

Le facteur optique est estimé en effectuant deux calculs permanents à $T=21^\circ\text{C}$ et en fixant $\lambda = 1091\text{nm}$: le premier en considérant le cristal photonique en argent et le second en

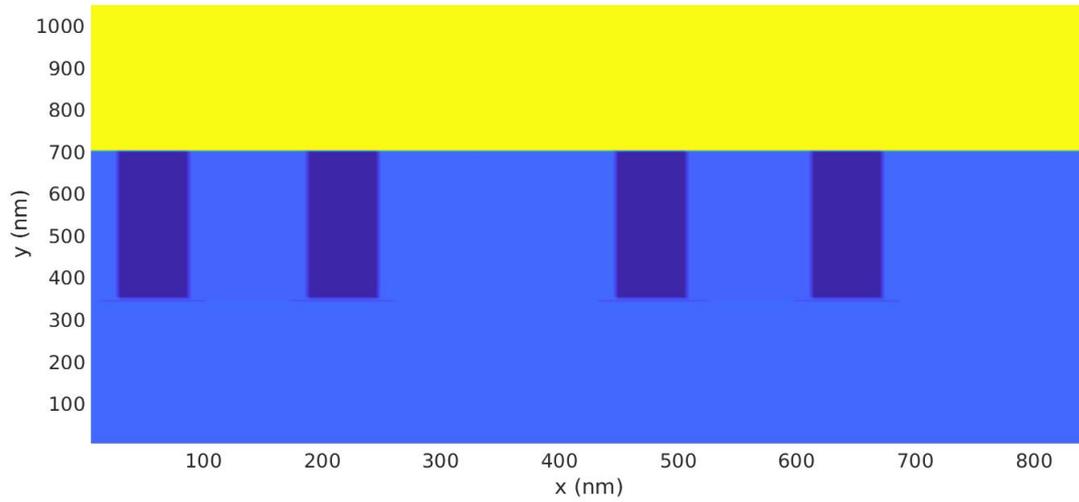


FIGURE 3.3 – Structure à CP 1D de période $2a$, immergée dans le substrat de LN

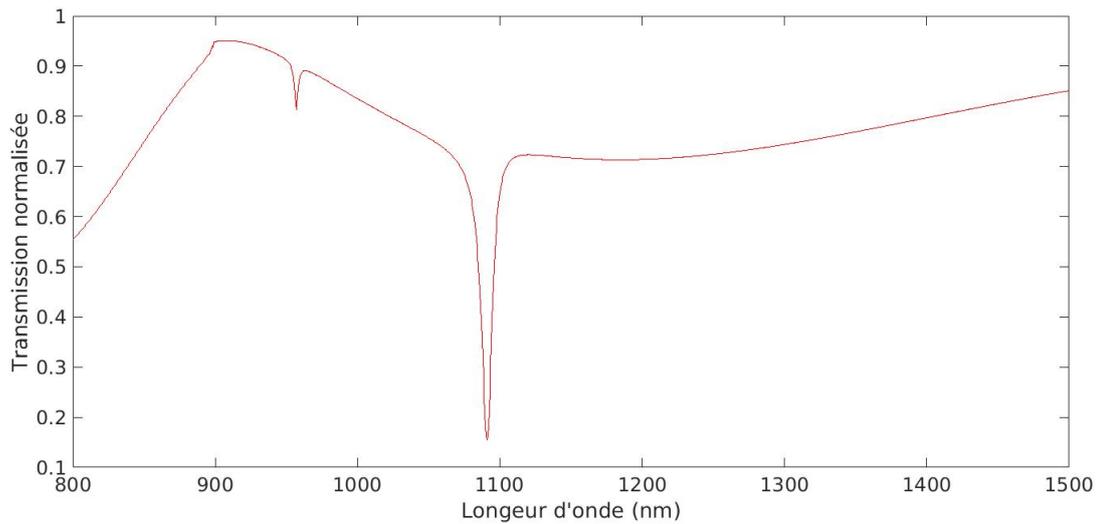


FIGURE 3.4 – Spectre de transmission obtenu pour la structure CP 1D de période $2a$

T(°C)	21	35	45	60	75
$\lambda_{res}(nm)$	1091	1101	1108.3	1119.2	1130.1
$\Delta\lambda_{res}$		10	17.3	28.2	39.1
$\Delta T(^{\circ}C)$		14	24	39	54
$\Delta \lambda_{res}/\Delta T(nm/^{\circ}C)$		0.71	0.73	0.72	0.72
facteur de qualité Q	128.35	101.94	89.75	72.20	59.79

TABLE 3.1 – Longueurs d’onde de résonance, le décalage ainsi que le facteur de qualité en utilisant la première approche

considérant la structure constituée uniquement de Niobate de Lithium massif sans les piliers en argent. Trois valeurs différentes du facteur f_{opt} sont obtenues et associées aux trois zones citées précédemment où le champ électrique est fortement confiné : $f_{opt} = 14.29$ pour le bas des piliers, $f_{opt} = 7.99$ pour la petite cavité et $f_{opt} = 3.85$ pour la grande cavité.

Les valeurs du facteur f_{opt} étant maintenant connues pour ces trois régions, ceci permet de remonter à la variation d’indice Δn en fonction de la température et de faire les calculs larges bandes de transmission en réajustant la valeur de l’indice de réfraction dans ces trois régions de notre structure.

La figure 3.6 montre les spectres de transmission normalisée obtenus pour différentes valeurs de la température. Le tableau 3.1 résume les longueurs d’onde de résonance pour différentes valeurs de ΔT . Comme on peut le constater sur cette figure et ce tableau, la longueur d’onde de résonance se déplace vers le rouge lorsque la température augmente. Comme dans le cas de la référence [7], la sensibilité moyenne estimée avec cette approche est de $0.72nm/C$.

3.3.1 Deuxième approche

La deuxième approche consiste à calculer localement le facteur f_{opt} en tout point de la grille FDTD où se trouve le niobate de lithium. Nous estimons que cette deuxième approche

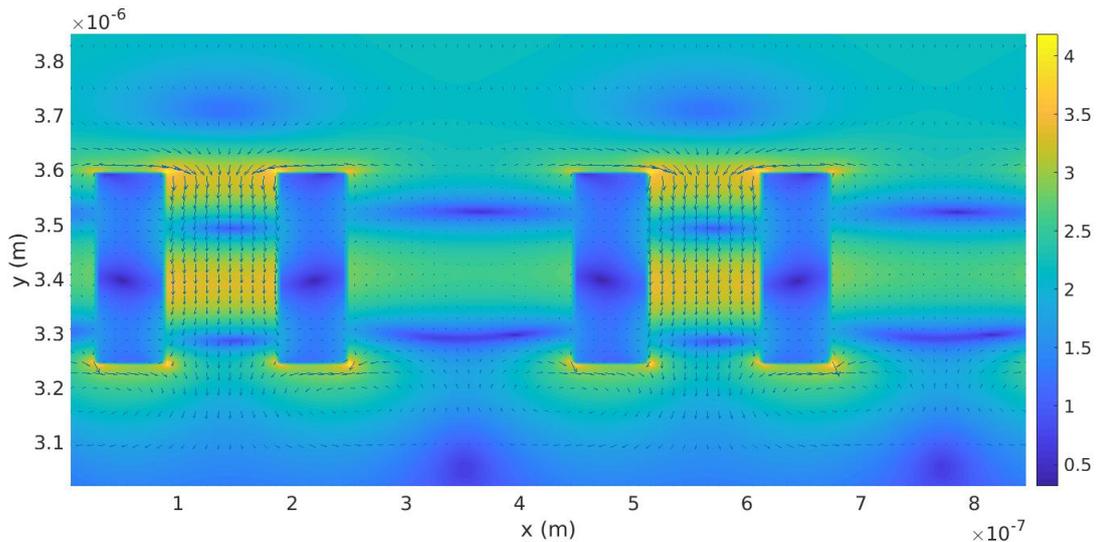


FIGURE 3.5 – Cartographie de distribution d’amplitude du champ électrique et vecteurs de poynting au pic de résonance

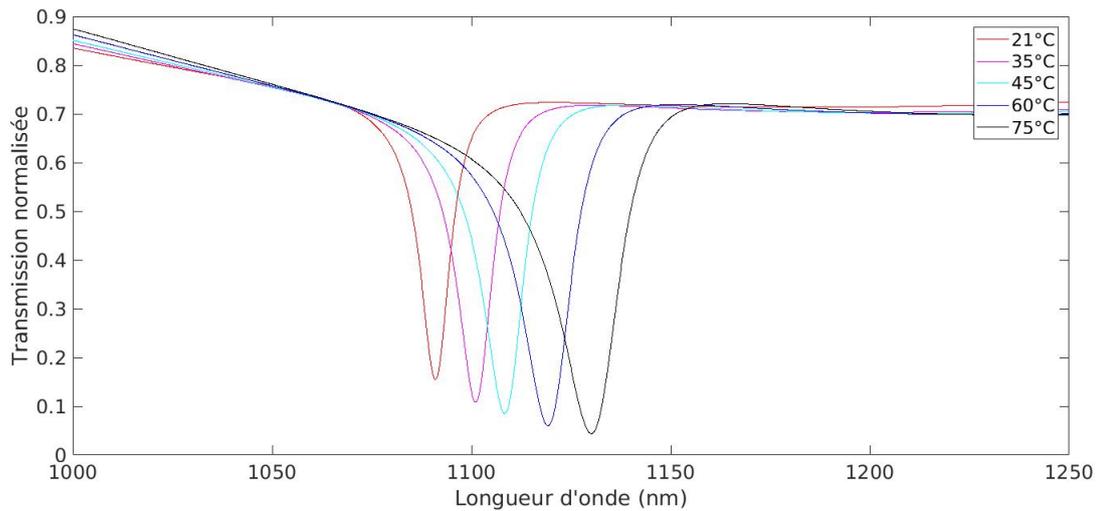


FIGURE 3.6 – Spectre de transmission normalisée centré autour de la résonance Fano pour différentes températures "première approche".

permet d'apprécier plus fidèlement la variation locale d'indice étant donné que la distribution du champ n'est pas uniforme en tout point de l'espace. La figure 3.7 correspond à l'image de la structure, obtenue en considérant les nouvelles valeurs de l'indice du milieu, réajustées par cette approche. Comme on peut le constater, la distribution de l'indice corrigé épouse la forme de la distribution de l'intensité électrique.

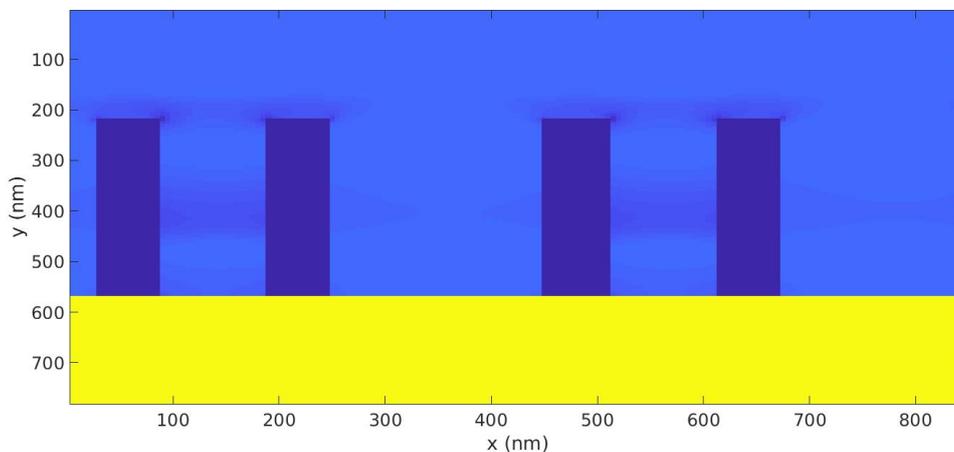


FIGURE 3.7 – Structure "double période" après la prise en compte du changement d'indice par la deuxième approche.

La figure 3.8 correspond aux spectres de transmission normalisée, calculée pour différentes valeurs de la température, obtenus en tenant compte des corrections locales de l'indice. La comparaison des figures 3.6 et 3.8 permet de constater que le décalage du pic de résonance en fonction de la température est beaucoup plus important lorsque l'indice est corrigé localement. Dans la suite de ce travail, c'est cette seconde approche qui est adoptée.

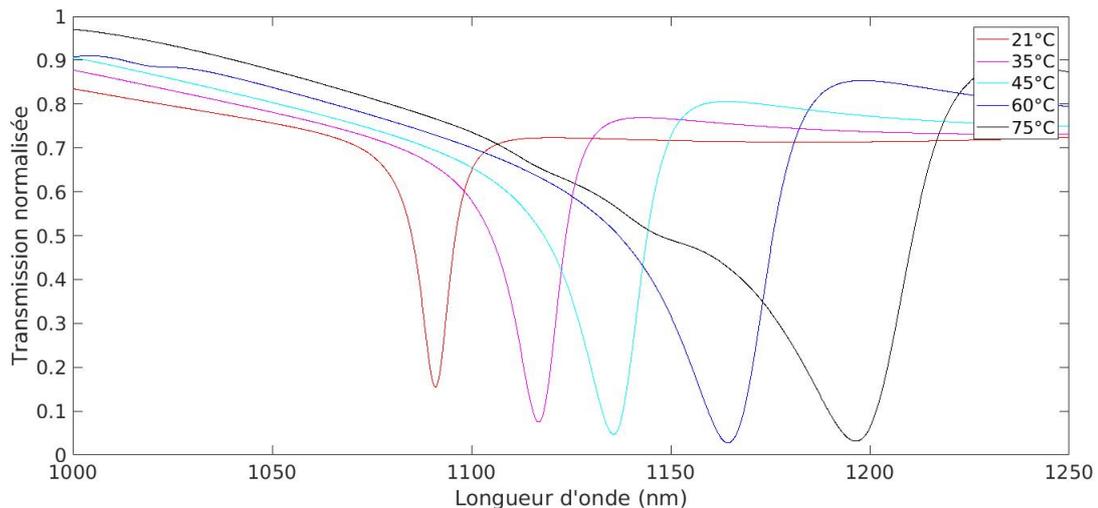


FIGURE 3.8 – Spectre de transmission normalisée centré autour de la résonance Fano pour différentes températures "deuxième approche".

T(°C)	21	35	45	60	75
$\lambda_{res}(nm)$	1091	1116.9	1135.6	1164	1196
$\Delta\lambda_{res}$		25.9	44.6	73	105
$\Delta T(^{\circ}C)$		14	24	39	54
$\Delta \lambda_{res} / \Delta T(nm/^{\circ}C)$		1.85	1.87	1.89	2.13
facteur de qualité Q	124.68	77.02	54.59	37.42	24.4

TABLE 3.2 – Longueurs d'onde de résonance, décalage ainsi que le facteur de qualité en utilisant la deuxième approche

3.4 Cas de structures finies

Dans cette dernière partie, l'étude a été réalisée à l'aide d'un code FDTD 2D avec PML partout qui permet d'étudier des structures finies suivant deux directions, et invariante suivant la troisième. Trois structures sont considérées en fonction du nombre de périodes N : $N=20$, 50 et 100. L'analyse de ces structures s'est faite de la même façon que dans le cas d'une structure infinie. Nous commençons par un calcul large bande afin de repérer la longueur d'onde de résonance Fano, puis un calcul permanent pour évaluer les effets pyroélectrique et électro-optique, et enfin un calcul large bande en tenant compte de la variation locale d'indice pour estimer la sensibilité à la température.

3.4.1 Structure comportant 100 périodes

Sur la figure 3.9 a été tracé le spectre de transmission normalisée pour une structure comportant 100 périodes. De prime abord, nous remarquons une nette similitude avec le cas infini. La réponse optique de la structure est préservée : même longueur d'onde de résonance et même facteur de qualité que le cas infini.

La distribution de l'intensité électrique, obtenue par un calcul permanent à la longueur d'onde de résonance, est représentée sur la figure 3.10 . Comme attendu, le confinement de l'énergie suit la même distribution que dans le cas infini. Néanmoins, en s'approchant des bords l'intensité

électrique diminue et sa distribution change en raison des effets de bords.

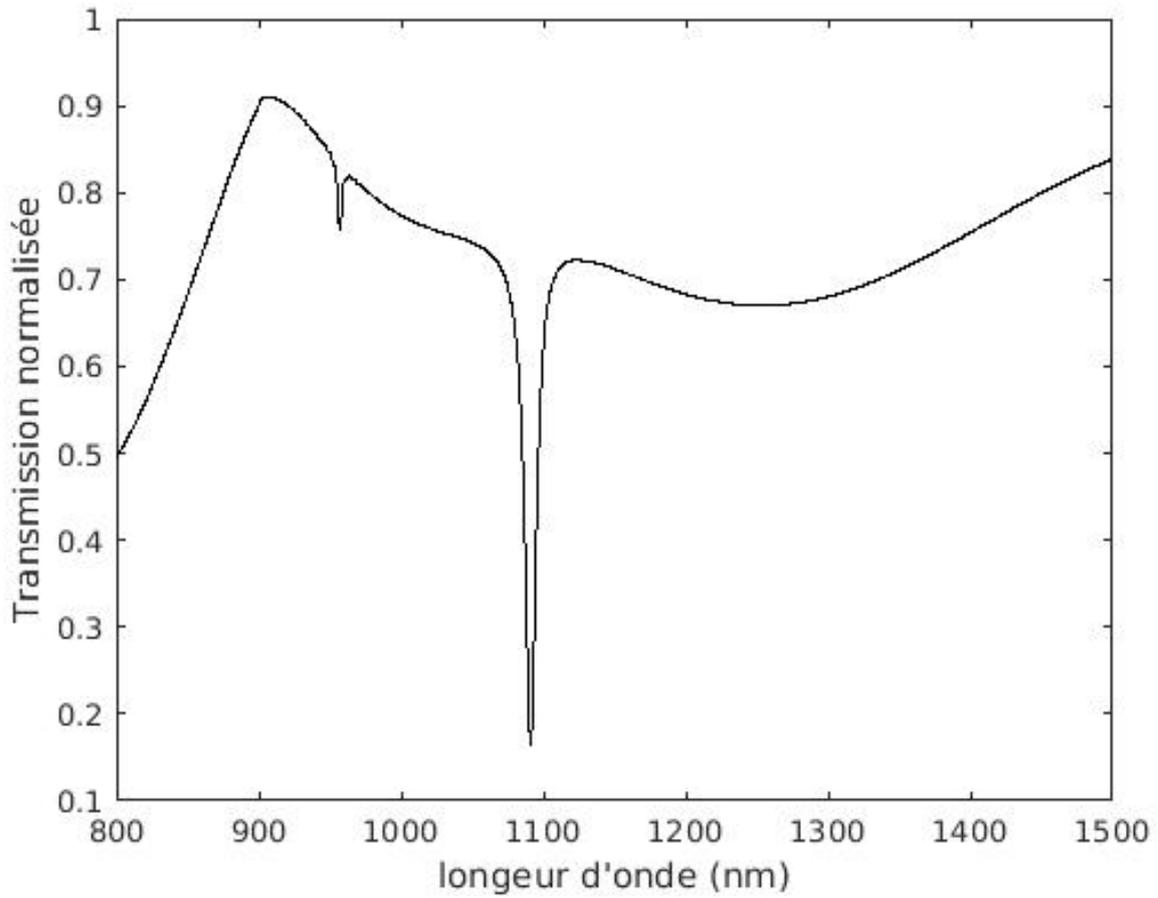


FIGURE 3.9 – Spectre de transmission normalisée pour la structure 100 périodes.

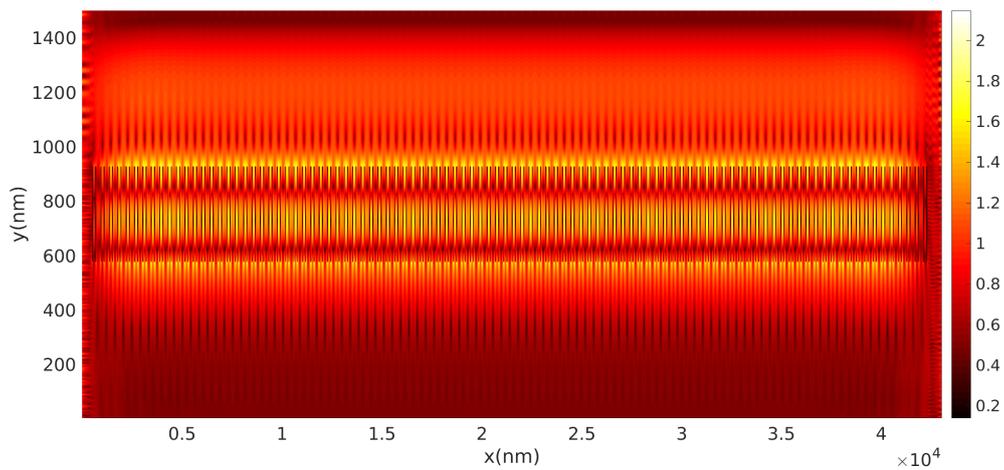


FIGURE 3.10 – Cartographie de la distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 100 périodes.

La figure 3.11 correspond aux spectres de transmission normalisée, calculée pour différentes valeurs de la température. Les valeurs des longueurs d'onde de résonance, des shifts

associés ainsi que celles des facteurs de qualité sont regroupés dans le tableau 3.3. La sensibilité obtenue est de l'ordre de $0.6 \text{ nm}/^\circ\text{C}$. Ceci est très satisfaisant et pouvant couvrir une plage de température pouvant dépasser les $70 \text{ }^\circ\text{C}$.

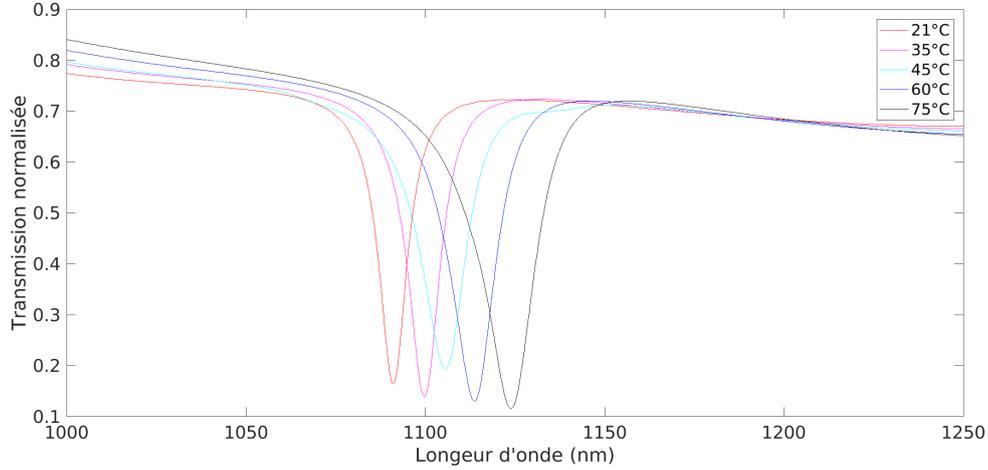


FIGURE 3.11 – Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 100 périodes.

T(°C)	21	35	45	60	75
$\lambda_{res}(nm)$	1091	1099.8	1105.6	1113.8	1124
$\Delta\lambda_{res}$		8.8	14.6	22.8	33
$\Delta T(^\circ\text{C})$		14	24	39	54
$\Delta \lambda_{res} / \Delta T(\text{nm}/^\circ\text{C})$		0.62	0.58	0.54	0.68
facteur de qualité Q	124.68	105.75	78.6	77.3.42	68.07

TABLE 3.3 – longueurs d'onde de résonance, shift ainsi que le facteur de qualité pour une structure de 100 périodes

3.4.2 Structure comportant 50 périodes

Pour pousser encore la miniaturisation, les calculs précédents sont repris en considérant une structure composée de 50 périodes. De la même façon que précédemment, nous avons calculé et tracé le spectre de transmission normalisée (voir figure 3.12). La réponse de la structure reste identique aux cas précédents. La distribution de l'intensité électrique, représentée sur la figure 3.13, est conforme à celle du mode considéré, néanmoins avec des effets de bords plus prononcés.

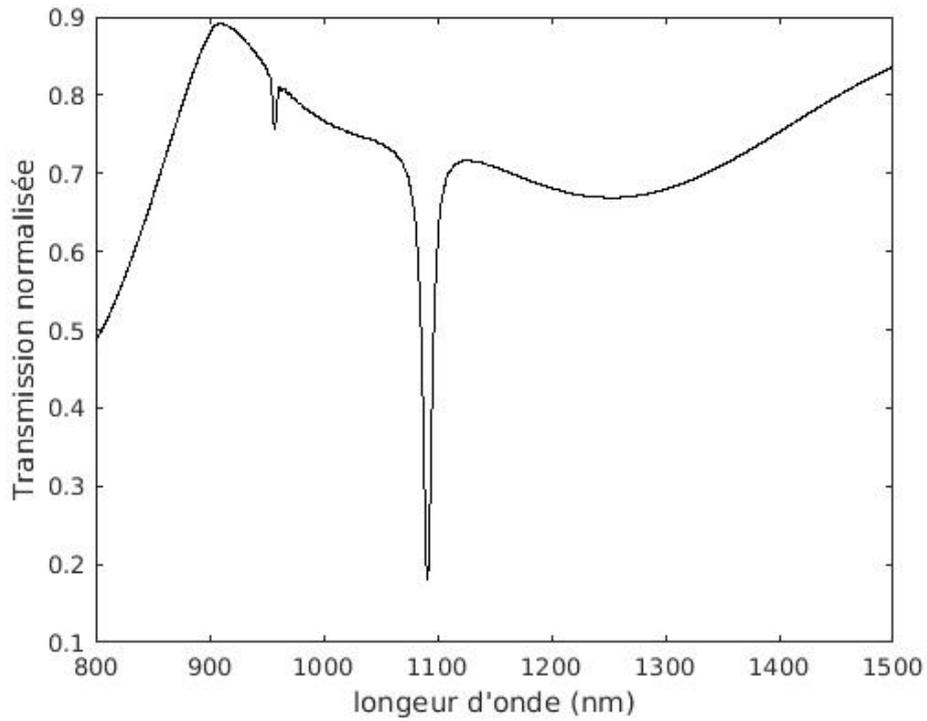


FIGURE 3.12 – Spectre de transmission normalisée pour la structure 50périodes.

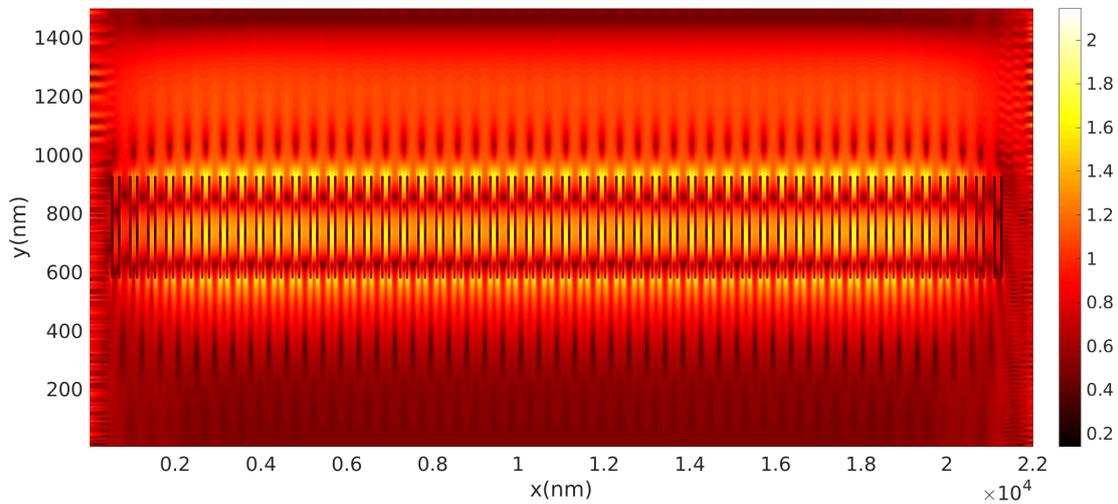


FIGURE 3.13 – Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 50 périodes.

La figure 3.14 correspond aux spectres de transmission normalisée, calculée pour différentes valeurs de la température. Les valeurs des longueurs d'onde de résonance, des shifts associés ainsi que celles des facteurs de qualité sont présentés dans le tableau 3.4. La sensibilité obtenue est de l'ordre de $0.6 \text{ nm}/^\circ\text{C}$, comme dans le cas de 100 périodes. Ceci est très satisfaisant en raison notamment des températures à mesurer pouvant dépasser les $70 \text{ }^\circ\text{C}$.

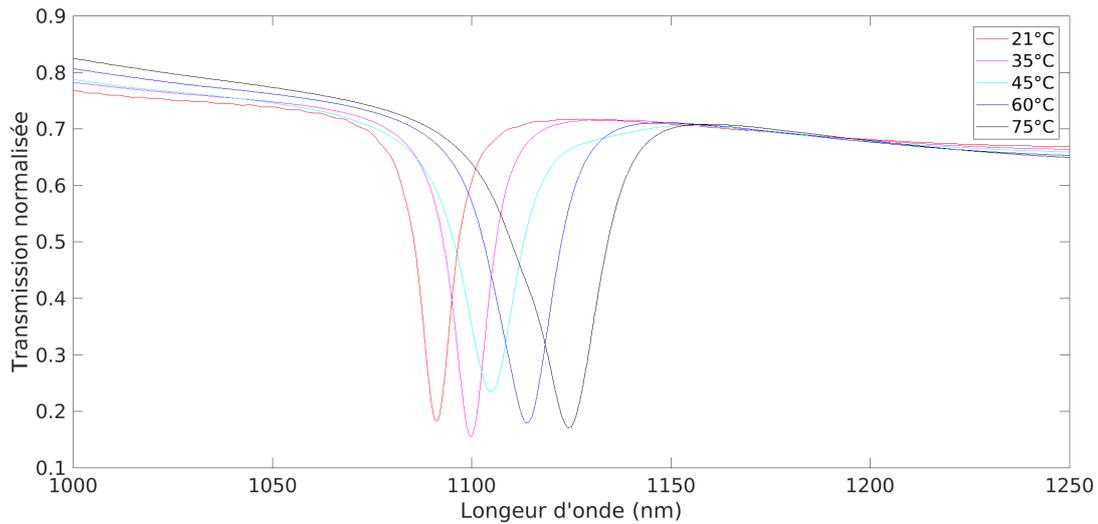


FIGURE 3.14 – Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 50 périodes.

T(°C)	21	35	45	60	75
$\lambda_{res}(nm)$	1091.2	1099.8	1105	1114	1124.4
$\Delta\lambda_{res}$		8.6	13.8	22.8	33.2
$\Delta T(^{\circ}C)$		14	24	39	54
$\Delta \lambda_{res} / \Delta T(nm/^{\circ}C)$		0.61	0.52	0.6	0.69
facteur de qualité Q	118.60	103.75	71.2	68.42	57.95

TABLE 3.4 – longueurs d’onde de résonance, shift ainsi que le facteur de qualité pour une structure de 50 périodes

3.4.3 Structure comportant 20 périodes

Sur la figure 3.15 a été tracé le spectre de transmission normalisée pour une structure comportant 20 périodes. Nous remarquons une similitude avec les cas précédents. Par la suite et dans l’optique de la démarche précédente, un calcul permanent est effectué afin de visualiser la répartition et le confinement du champ électrique dans notre structure (voir figure 3.16). Notons que les effets de bords sont très importants impactant la distribution de l’énergie, ce qui est susceptible d’affecter la sensibilité de la structure à la température.

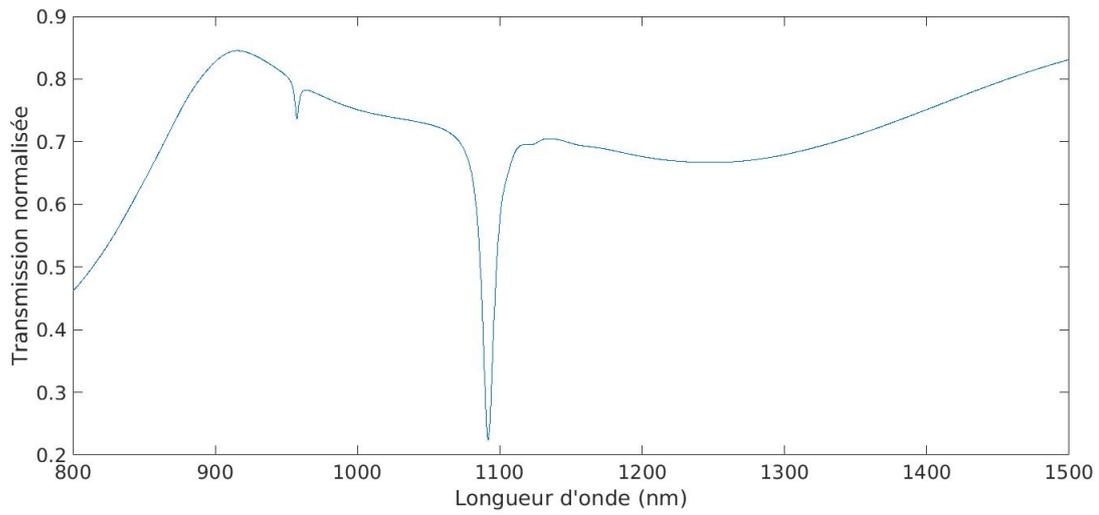


FIGURE 3.15 – Spectre de transmission normalisée pour la structure 20 périodes.

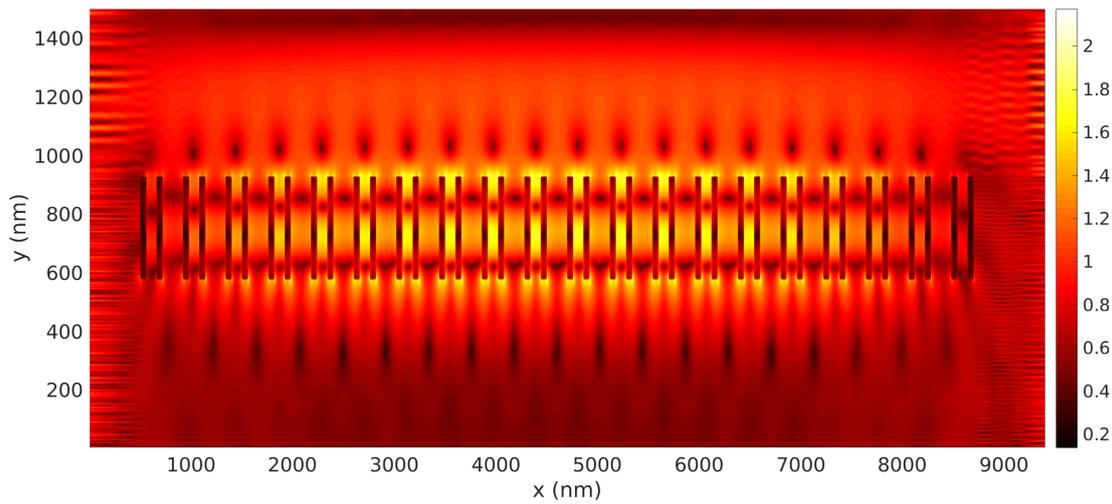


FIGURE 3.16 – Cartographie de distribution d'amplitude du champ électrique au pic de résonance pour une structure de 20 périodes.

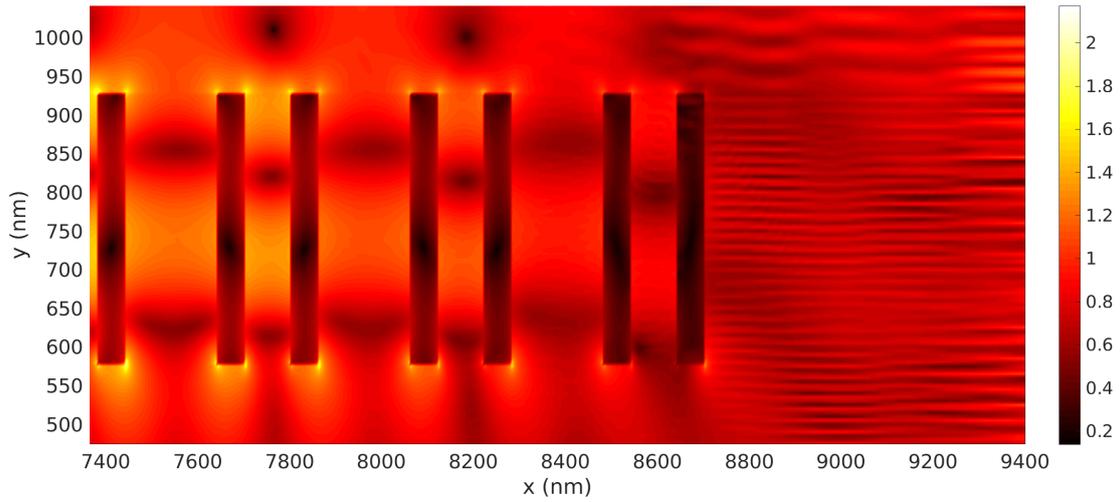


FIGURE 3.17 – Cartographie de distribution d’amplitude du champ électrique au pic de résonance au bord de la structure de 20 périodes.

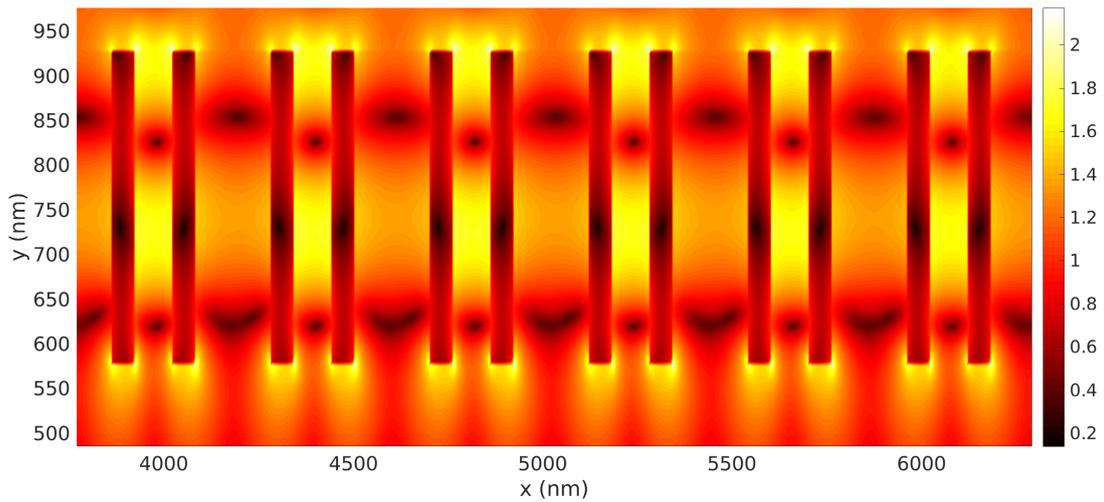


FIGURE 3.18 – Cartographie de distribution d’amplitude du champ électrique au pic de résonance au centre de la structure de 20 périodes.

Les figures 3.17 et 3.18 montrent une répartition inhomogène du champ électrique entre les périodes du bord et celles du centre de notre structure et ceci permet de justifier le choix de la deuxième approche pour le calcul du facteur f_{opt} .

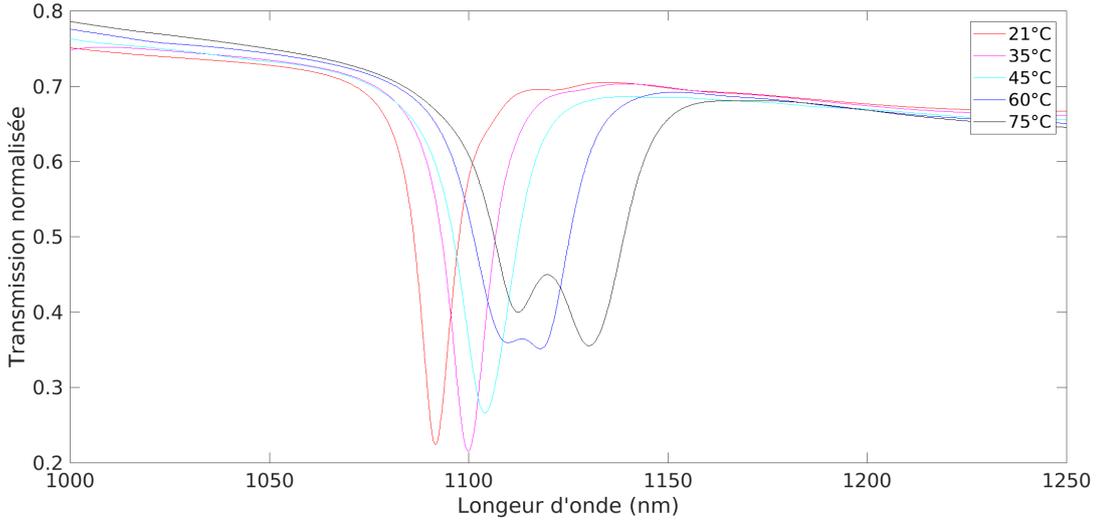


FIGURE 3.19 – Spectre de transmission normalisée en fonction de la température pour la structure 20 périodes.

Sur la figure 3.19 les trois premières courbes correspondant respectivement à 21°C, 35°C et 45°C présentent une grande similarité avec les cas précédents. Les valeurs des longueurs d'onde de résonance, des shifts associés ainsi que celles des facteurs de qualité sont présentés dans le tableau 3.5. À partir de 60°C, les spectres de transmission deviennent larges et déformés rendant ainsi difficile leur exploitation. Ceci réduit la gamme de température mesurable avec cette structure.

T(°C)	21	35	45
$\lambda_{res}(nm)$	1091.8	1100	1104.2
$\Delta\lambda_{res}$		8.2	12.4
$\Delta T(^{\circ}C)$		14	24
$\Delta \lambda_{res} / \Delta T(nm/^{\circ}C)$		0.58	0.42
facteur de qualité Q	112.55	96.49	75.11

TABLE 3.5 – longueurs d'onde de résonance, shift ainsi que le facteur de qualité pour une structure de 20 périodes

3.5 Conclusion

Nous avons étudié la sensibilité à la température d'un réseau 1D en argent incrusté dans le Niobate de Lithium, en exploitant les propriétés pyroélectrique et électro-optique de celui-ci et les résonances Fano supportées par ces structures. Nous avons d'abord commencé par les réseaux infiniment périodique pour ensuite s'attaquer aux cas des structures réalistes comportant un nombre de périodes fini. Le facteur optique est calculé par deux approches : l'une consiste à considérer des moyennes de ce facteur sur des régions de fort confinement et la seconde à l'évaluer localement en chaque point de la grille FDTD où le Niobate de Lithium est présent. Contenu, de la répartition inhomogène de l'intensité électrique, qui est plus prononcée dans le cas des structures finies, nous avons adopté l'approche locale pour l'étude de ces structures.

Les résultats obtenus ont montré que la sensibilité à la température des structures finies est très satisfaisante ; des température dépassant les 70 °C peuvent être détectées avec des structures composées de 50 périodes. En poussant un peu plus la miniaturisation de nos structures (en passant à 20 périodes), la sensibilité du détecteur reste acceptable mais la gamme de température mesurable est réduite.

Conclusion générale

Grâce aux différentes propriétés qu'ils possèdent, la gamme d'utilisation des cristaux photoniques n'a cessé de s'élargir et en particulier dans le domaine des télécommunications et pour la fabrication de différents types de capteurs. Cette étude s'est centrée sur la détection de température.

Dans une première partie nous avons étudié une structure infinie constituée d'un cristal photonique déposé sur un substrat en Niobate de Lithium. Cette structure a été modélisée en utilisant un code 2D FDTD qui tient compte de la dispersion de l'argent. Le but recherché étant d'exploiter les effets pyroélectrique et électro-optique du LN ainsi que la résonance Fano supportée par les réseaux 1D.

La seconde partie est dédiée à l'étude de la sensibilité à la température des structures périodiques réalistes comportant un nombre de motifs fini. Cette a été menée par un code FDTD 2D sur une fenêtre de calcul délimitée par des PML uniquement.

Les résultats obtenus ont montré que la sensibilité à la température de nos structures réalistes est très satisfaisante. Des structures constituées de seulement 50 motifs ont pu détecter des températures dépassant les 70 °C avec une qualité comparable aux structures infinies. En considérant une structure plus miniaturisée, composée de 20 périodes, nous avons trouvé sensibilité acceptable avec cependant une réduction de la gamme de température mesurable.

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”. In : *Physical review letters* 58.20 (1987), p. 2059.
- [2] Sajeev JOHN. “Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices”. In : *Physical review letters* 58.23 (1987), p. 2486.
- [3] Lionel BIGOT et Philippe ROY. “fibres à cristal photonique : 10 ans d’existence et un vaste champ d’application”. In : *Image de la Physique INIST-CNRS* ISSN 0290-0041 (2007), p. 71-80.
- [4] Jean-Michel LOURTIOZ, Henri BENISTY et Vincent BERGER. “Les cristaux photoniques ou la lumière en cage”. In : (2003).
- [5] Luis ARIZMENDI. “Photonic applications of lithium niobate crystals”. In : *physica status solidi (a)* 201.2 (2004), p. 253-283.
- [6] Oscar PAINTER, J VUČKOVIĆ et Axel SCHERER. “Defect modes of a two-dimensional photonic crystal in an optically thin dielectric slab”. In : *JOSA B* 16.2 (1999), p. 275-285.
- [7] BRAIK MACILIA. “Modélisation de structures périodiques photoniques en vue de concevoir un détecteur de température”. In : (2017).
- [8] the free encyclopedia WIKIPEDIA. “Wikipedia. Lithium niobate”. In : () .
- [9] Michel AILLERIE. “Etude comparée des méthodes de mesure des coefficients électro-optique : application à LiNbO₃”. Thèse de doct. Université Paul Verlaine-Metz, 1991.
- [10] Jassem SAFIOUI. “Nouvelle technique de photo-inscription dans LiNbO₃ : autofocalisation contrôlée par effet pyroélectrique”. Thèse de doct. Université de Franche-Comté, 2010.
- [11] Weidong ZHOU et al. “Progress in 2D photonic crystal Fano resonance photonics”. In : *Progress in Quantum Electronics* 38.1 (2014), p. 1-74.
- [12] Andrey E MIROSHNICHENKO, Sergej FLACH et Yuri S KIVSHAR. “Fano resonances in nanoscale structures”. In : *Reviews of Modern Physics* 82.3 (2010), p. 2257.
- [13] Kane YEE. “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media”. In : *IEEE Transactions on antennas and propagation* 14.3 (1966), p. 302-307.
- [14] M HAMIDI et al. “Implementation of the critical points model in a SFM-FDTD code working in oblique incidence”. In : *Journal of Physics D : Applied Physics* 44.24 (2011), p. 245101.
- [15] Jean-Pierre BERENGER. “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves”. In : *Journal of computational physics* 114.2 (1994), p. 185-200.

- [16] Elie ATIE. “Modeling of high electromagnetic field confinement metamaterials for both linear and non-linear applications”. Thèse de doct. Déc. 2016. DOI : 10.13140/RG.2.2.10588.80006.
- [17] Wentao QIU et al. “Ultra-compact on-chip slot Bragg grating structure for small electric field detection”. In : *Photonics research* 5.3 (2017), p. 212-218.
- [18] GE PETERSON et al. “Electro-Optic Properties of LiNbO₃”. In : *Applied Physics Letters* 5.3 (1964), p. 62-64.