



HAL
open science

Modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle de réseaux complexes. Application au filtrage spectral dans les imageurs CMOS.

Guillaume Demésy

► **To cite this version:**

Guillaume Demésy. Modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle de réseaux complexes. Application au filtrage spectral dans les imageurs CMOS.. Physique [physics]. Université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 2009. Français. NNT: . tel-00436046

HAL Id: tel-00436046

<https://theses.hal.science/tel-00436046>

Submitted on 25 Nov 2009

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

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

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ PAUL CÉZANNE, AIX-MARSEILLE III

pour obtenir le grade de Docteur

N° 2009AIX30006

École doctorale : Physique et sciences de la matière

Spécialité : Optique, électromagnétisme et image

Modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle de réseaux complexes. Application au filtrage spectral dans les imageurs CMOS.

Guillaume DEMÉSY

Institut Fresnel – Marseille
STMicroelectronics – Rousset

Soutenue publiquement le 16 avril 2009

Membres du jury :

Pierre CHAVEL	Rapporteur	DR CNRS, Institut d'Optique
Didier FELBACQ	Rapporteur	Pr. Université Montpellier 2
Françoise LOZES-DUPUY	Examineur	DR CNRS, LAAS Toulouse
André NICOLET	Examineur	Pr. Université Paul Cézanne
Frédéric ZOLLA	Examineur	Pr. Université de Provence
Brendan DUNNE	Responsable industriel	Ingénieur, STMicroelectronics
Mireille COMMANDRÉ	Directeur de thèse	Pr. École Centrale Marseille

Remerciements

Cette thèse s’est déroulée dans le cadre d’une convention CIFRE et repose sur la collaboration entre deux partenaires de la région PACA : l’Institut Fresnel et STMicroelectronics (site de Rousset).

Je tiens tout d’abord à remercier Mireille COMMANDRÉ (directeur de thèse à l’Institut Fresnel, équipe MAP2) et Brendan DUNNE (tuteur industriel à STMicroelectronics Rousset), sans qui cette bourse de thèse CIFRE n’aurait jamais vu le jour. Mireille a su me guider et canaliser mes maints égarements pendant trois ans. Je lui suis infiniment reconnaissant de m’avoir suivi, conseillé et encouragé au cours de cette thèse, tout en m’accordant une grande liberté d’action et la possibilité de voyager. Je remercie vivement Brendan, pour son époustouflante capacité à imaginer des solutions technologiquement réalisables en réponse à mes élucubrations en matière de structures de test CMOS biscornues. Je les remercie également tous les deux pour leur grande disponibilité et patience à mon égard malgré leurs emplois du temps surchargés.

Cette thèse a été l’occasion d’asseoir une autre collaboration fructueuse (je l’espère) au sein de l’Institut Fresnel, entre les équipes MAP2 et CLARTE. Entreprendre la modélisation électromagnétique rigoureuse de structures périodiques aussi complexes qu’un pixel CMOS n’aurait en effet pas été envisageable sans l’aide inestimable de deux Professeurs et non moins acolytes du Troisième Étage. Frédéric ZOLLA (Professeur à l’Université de Provence) a tout simplement su m’apprendre, non sans éloquence, humour et concision, la manière d’aborder sagement un problème physique. J’ai fini par comprendre les principes fondamentaux de la méthode des éléments finis et les jeux de mots les plus subtilo-improbables grâce à André NICOLET (Professeur à l’Université Paul Cézanne). Qu’ils soient tous deux assurés que je n’oublierai rien de leurs précieux enseignements.

Les directeurs et co-directeurs d’adoption susdits ont fait partie de mon jury de

thèse. Une nouvelle fois, je leur en suis reconnaissant. Je tiens également à remercier Pierre CHAVEL, Directeur de l'Institut d'Optique, et Didier FELBACQ, Professeur à l'Université Montpellier 2, qui ont accepté de rapporter sur mon manuscrit. Un grand merci enfin à Françoise LOZES, Directrice de Recherche au LAAS, qui m'a fait l'honneur de présider mon jury de thèse.

Cette thèse ne se serait pas déroulée aussi sereinement sans les conseils avisés, les qualités d'écoute et didactiques, la disponibilité (dont j'ai sans doute parfois abusé) d'Olivier GAGLIANO, ingénieur à STMicroelectronics. Il m'a été d'une aide précieuse pour assurer la cohérence globale de mon travail et pour les étapes de conception et de caractérisation des structures CMOS. À ce dernier titre, j'en profite pour remercier Patrice RAY. Merci à Valérie SERRADEIL-LUDON de m'avoir accueilli au sein du groupe Modeling à STMicroelectronics. J'adresse d'ailleurs un grand merci aux membres de cette équipe (Julien, Christian, Renaud, Sylvain, Seb, Roberto) pour les agréables moments que j'ai pu passer avec eux.

Pour la conception et caractérisation des structures CMOS, je tiens à remercier Stéphane RICQ (ST Crolles), Damien BARKAREL (IM2NP), Frédéric LORUT (ST Crolles), Jean-René JACOB (ST Rousset), toute l'équipe de carac (RCCAL ST Rousset) et Jean-Pierre SPINELLI (Institut Fresnel).

Les personnes suivantes ont largement contribué à mon épanouissement (et à la bonne humeur générale) au sein du lab : Seb, Capou, Davy, Cyril, David, Sophie, Mika, Alé, Fabiana, Benoît C., Jacques, Alexis, Marie, Marie-Maude, Simon, Nadine, Pierre G., Thomas... Que ce soit autour d'un café, d'une clope, d'un cordon bleu-jardinière au RU trois étoiles de Saint-Jérôme ou d'une mauresque, mes chers collègues, votre compagnie fut des plus agréables ! Veuillez trouver ici la marque de mon amitié.

Les remerciements qui suivent ont une teneur certes moins scientifique à proprement parler, mais je n'aurais pu garder motivation et enthousiasme sans les personnes citées ci-après.

Je remercie Marie pour son tendre soutien.

Merci à mes parents, à mes frangin et soeurette, à Mouty, à Mamie, à mes cousins qui ont toujours su se montrer intéressés par mes travaux, ou du moins feindre avec brio une lueur d'intérêt convaincante. J'espère que nous aurons d'autres conversations commençant par "Mais alors, un photon qui arrive sur ton truc, là, [...]".

Merci à tous les potes. En particulier et en vrac inversement chronologique, les

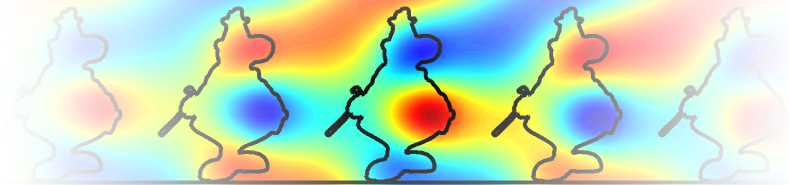
comparses ex-Supo de ma promo (Manue, Charly, Alex, Fix, Brice), de la promo du dessus (Antoine, Rémi, Ju, Kokos, Fabien, Stan, JY et l'ESObèzes associés) et les copains Rambolitains (Roro, Antoine, Nico N.& Co). Merci à Nico G. et Seb de m'avoir fait découvrir Marseille. Merci à Ben pour les grands moments de jonglage, monocycle, pacman, pétanque et autres excentricités ludiques passées ensemble.

Eh peuchère ! J'allais presque oublié de remercier humblement le Mistral d'avoir régulièrement soufflé sur nos côtes, permettant une pratique assidue de la planche à voile.

”L’homme de science le sait
bien, lui, que seule la science, a pu,
au fil des siècles, lui apporter l’horloge
pointeuse et le parc-mètre automatique sans
lesquels il n’est pas de bonheur terrestre possible.”

Pierre Desproges, *Vivons heureux en attendant la mort.*

“IL M’APPARAÎT DE PLUS EN PLUS CLAIREMENT QUE
LES MOTIFS TÉNÉBREUX DE CETTE OBSCURITÉ
S’ENROBENT D’UN MYSTÈRE OPAQUE ASSEZ
PEU PROPICE AUX INTERPRÉTATIONS
LUMINEUSES !”



“CE MYSTÈRE
ME CRISPE LES
CIRCONVOLUTIONS QUE
J’AI POURTANT SOUPLES !”

Achille Talon (par Greg),
à propos d’une ampoule récalcitrante.

À la mémoire de mes Grand-pères.

Table des matières

Table des matières	vi
Introduction	1
1 Contexte : de la miniaturisation du capteur CMOS	7
1 L'appareil photographique à capteur CMOS	10
1.1 Plongée au cœur d'un capteur hautement intégrable	10
1.2 Les problématiques liées à la miniaturisation du capteur	12
1.3 Principe de fonctionnement d'un capteur d'image	13
1.4 Composition du pixel de capteur CMOS	14
1.5 Principe de restitution de la couleur utilisé	18
2 Les méthodes de filtrage colorimétrique alternatives existantes	24
2.1 Solutions commercialisées	24
2.2 Solutions interférentielles potentielles	27
3 Filtrage diffractif	31
3.1 La Nature	32
3.2 ...imitée par l'Homme	33
2 Formulation scalaire de la FEM adaptée à l'étude de réseaux mono- dimensionnels quelconques	43
1 Développement théorique de la méthode scalaire	46
1.1 Description du problème et notations	46
1.2 Découplage des champs et z-anisotropie	49
1.3 Passage du problème diffractif à un problème radiatif à sources localisées	49

1.4	Expression du terme source	52
1.5	Couches Parfaitement Adaptées (PML)	53
1.6	Formulation faible et quasi-périodicité	56
1.7	Maillage et éléments finis	58
1.8	Synthèse de la méthode	59
2	Considérations énergétiques	61
2.1	Ordres de diffraction et efficacités	61
2.2	Réponse spectrale et efficacité quantique d'une photodiode	62
3	Validation et illustration numériques de la méthode	64
3.1	Le réseau mono-dimensionnel partiellement conducteur	64
3.2	Le cas z-anisotrope	66
3.3	Le cas de géométries complexes	68
3	Application à la caractérisation de réseaux mono-dimensionnels en technologie CMOS	71
1	Présentation de l'expérience	71
1.1	Structures de test à géométrie bi-dimensionnelle	71
1.2	Étude spectrale : Banc de mesure d'Efficacité Quantique	73
2	Confrontation du modèle aux résultats expérimentaux	74
2.1	Larges photodiodes sans réseau	74
2.2	Larges photodiodes avec réseau mono-dimensionnel enterré	75
2.3	S'affranchir numériquement des contraintes de procédés de fabrication pour augmenter la transmission du réseau	76
3	Réseaux de silicium polycristallin	79
4	Formulation vectorielle de la FEM adaptée à l'étude de réseaux croisés quelconques	81
1	Développements théoriques	82
1.1	Définition du problème vectoriel et notations	82
1.2	Passage d'un problème de diffraction à un problème radiatif à sources localisées	85
1.3	Quasi-périodicité et formulation faible	86
1.4	Éléments d'arêtes (ou de Whitney) d'ordre 2	87
2	Considérations énergétiques	90

2.1	Efficacités de diffraction	90
2.2	Calcul des pertes dues à l'effet Joule	92
3	Validation numérique et convergence du calcul	93
3.1	Cas classiquement traités	93
3.2	Convergence et temps de calcul	99
5	Application à la conception de réseaux croisés embarqués dans un pixel CMOS	103
1	Réseaux croisés métalliques sur substrat de silice	103
1.1	Candidats retenus pour le filtrage RGB	103
1.2	Performances colorimétriques	106
2	Première réalisation sur une matrice pixel standard	111
2.1	Élaboration des structures pixel	111
2.2	Réponse du pixel diffractif	113
	Conclusion et perspectives	119
	Conclusion générale	119
	Perspectives	121
	Annexes	125
A	Calcul du champ électrique vectoriel dans un empilement multicouches	127
1	Problème et notations	127
2	Relation de récurrence vérifiée par les composantes transverses	128
2.1	Passage d'une interface $z = z_i$	128
2.2	Transport dans une couche d'épaisseur e_i	130
3	Coefficients de réflexion/transmission	130
B	Étude de l'influence des paramètres de réseaux croisés métalliques sur verre	131
C	Bancs de mesure optique	135
D	Glossaire	139
	Bibliographie	141

Introduction

On peut définir la couleur comme la *sensation*, interprétée par notre cerveau, reçue par l'intermédiaire de notre *œil* de la vision d'un *élément coloré* [1]. La perception de la couleur par l'œil humain relève d'une combinaison de processus extrêmement complexes et dynamiques. Lorsque l'*élément coloré* est une photographie en couleurs, qu'elle soit imprimée, projetée ou affichée sur un écran, l'auteur du cliché s'attend à percevoir la même *sensation de couleur* que devant son modèle. Pourtant, entre une prise de vue numérique et son visionnage, l'information en couleurs provenant de la scène originale aura été filtrée, traitée numériquement, et enfin affichée sur un support, numérique ou papier, doté de ses propres caractéristiques colorimétriques.

Il n'est donc pas surprenant de constater que le principe de fonctionnement de l'appareil photographique numérique couleur soit proche de celui de l'œil. En effet, une image de la scène est formée sur un capteur, (la rétine dans le cas de l'œil), placé dans le plan focal image d'un objectif (l'ensemble cornée plus cristallin dans le cas de l'œil). La surface photo-sensible, ou capteur, est composée de pixels (l'équivalent des cellules élémentaires photo-sensibles appelées cônes dans la rétine humaine). Il existe trois types de pixels permettant la décomposition de l'image spatialement, et spectralement selon les trois couleurs Rouge, Vert et Bleu (RVB). Dans un imageur, ces pixels colorés sont généralement arrangés selon un motif dit de *Bayer* [2], constitué de deux pixels Verts pour un Rouge et un Bleu. Ce motif est répété périodiquement selon les deux directions perpendiculaires à l'axe de visée. L'absorption de la lumière est assurée par le silicium, qui est aussi photo-sensible dans le proche infra-rouge, contrairement à la rétine humaine. La composante infra-rouge doit donc être soustraite, par exemple entre l'objectif et le capteur. L'image résultante est finalement interprétée par un circuit électronique de post-traitement (opération effectuée par le cerveau pour la vision en couleur humaine).

Deux technologies, CCD (de l'anglais *Coupled Charged Device*) et CMOS (de l'anglais *Complementary Metal Oxide Semi-conductor*) sont actuellement employées pour la fabrication de capteurs numériques. La technologie CMOS permet en effet de les produire à faible coût, en quantité élevée, et est particulièrement adaptée aux applications de type portable requérant une faible consommation électrique. Depuis l'avènement de l'ère numérique, on utilise massivement ce type de capteurs en photographie et en vidéo. Leur domaine d'application "grand public" comprend notamment la téléphonie mobile, l'automobile, les micro-caméras et souris pour ordinateur, les caméras de surveillance, et les appareils photographiques compacts et réflex. Leur marché jouit donc d'une croissance forte et les sociétés (STMicroelectronics, Micron, Eastman Kodak, Canon, Nikon, Toshiba, Samsung, Sony, Matsushita, Omnivision. . .) qui se sont lancées dans ce domaine sont devenues des poids-lourds de l'industrie CMOS, tant les volumes de production demandés sont conséquents.

Dans le domaine des téléphones mobiles, les constructeurs proposent, au fil des années, des appareils de plus en plus petits et performants, comprenant toujours plus de fonctionnalités. L'offre en imageur CMOS doit donc s'adapter à cette tendance à la miniaturisation et proposer des modules photographiques complets de plus en plus intégrables et performants. De génération en génération, les capteurs CMOS se doivent donc d'être plus petits tout en étant mieux résolus, et donc contenir plus de pixels par unité de surface.

L'impact sur les mensurations de consigne du pixel est conséquent. Celui-ci est constitué d'une photodiode surmontée de niveaux métallo-diélectriques, puis d'un filtre coloré basé sur l'absorption, dont le profil spectral en transmission est fixé par l'épaisseur déposée, et d'une micro-lentille assurant la focalisation de la lumière incidente sur la surface du silicium. Les progrès constants en finesse de gravure réalisés par l'industrie des semi-conducteurs permettent de diminuer les dimensions transverses (orthogonales à la direction de l'axe de visée) de cette structure complexe, d'année en année, pour atteindre l'ordre de grandeur du micron. Cependant, l'épaisseur du capteur décroît proportionnellement moins vite que la section du pixel. Il en résulte des structures parallélépipédiques étroites et profondes, surmontées de filtres colorés dont les épaisseurs ne peuvent être réduites sous peine de modifier spectralement leur transmission. Dans de telles structures, les phénomènes de diaphotie entre pixels deviennent très importants, en partie dus à la diffraction de la lumière incidente. Enfin,

le pouvoir de focalisation des micro-lentilles se trouve de plus en plus réduit, puisque les dimensions atteintes par la section du pixel deviennent propices au phénomène de diffraction.

Les moyens de modélisation basés sur les lois géométriques de Snell-Descartes deviennent obsolètes et il faut désormais résoudre les équations Maxwell, de façon rigoureuse, au sein du pixel.

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse, basée sur une collaboration entre STMicroelectronics et l'Institut Fresnel et réalisée dans le cadre d'une convention CIFRE. Elle porte sur la modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle rigoureuse du pixel de l'imageur CMOS, prenant donc en compte les phénomènes de diffraction, et sur son application à la possibilité de concevoir et d'intégrer des structures diffractives à même d'assumer les différentes fonctions de filtrage spectral. Les valeurs ajoutées de ces filtres seraient une épaisseur plus petite et une localisation dans l'empilement plus proche du silicium. Ils doivent cependant conserver les atouts des filtres colorés actuels : des profils spectraux en transmission adaptés à l'espace couleur RVB, des maxima en transmission élevés, une acceptation angulaire d'au moins 30° et une indépendance vis-à-vis de la polarisation incidente. Enfin, pour déterminer les caractéristiques opto-géométriques (matériaux et géométrie des motifs) de ces réseaux, il convient d'employer une méthode de résolution des équations de Maxwell adaptée aux géométries tri-dimensionnelles périodiques les plus variées, ainsi qu'aux matériaux à pertes. Nous avons à cet effet développé une nouvelle formulation de la méthode des éléments finis (en anglais *Finite Element Method*, FEM).

Ce mémoire est composé de cinq chapitres. Les aspects liés à la théorie (chapitres 2 et 4) de la modélisation de structures périodiques par la FEM sont volontairement séparés de ceux concernant les applications, leur réalisation et leur caractérisation expérimentale (chapitres 3 et 5), pour une lisibilité adaptée aux motivations du lecteur. Dans un premier chapitre, nous présentons en détail les principes de fonctionnement du capteur CMOS et ses différences structurelles avec les capteurs CCD. La constitution du pixel CMOS y est détaillée, ainsi que ses limitations optiques actuelles. Nous nous arrêtons sur la pertinence de l'espace couleur RVB choisi, sur les alternatives existantes pour le motif de Bayer traditionnel et pour les résines colorées absorbantes. Enfin, une étude bibliographique sur les méthodes de filtrage diffractif dans le visible est menée, indépendamment du contexte des imageurs CMOS. Il en ressort un jeu de

solutions potentiellement adaptables au pixel.

Dans un second chapitre, sont développées les bases théoriques de la méthode adaptée au calcul du champ scalaire Transverse Électrique (TE) ou Transverse Magnétique (TM) diffracté par un réseau mono-dimensionnel quelconque. Il s'agit d'une nouvelle formulation de la FEM levant rigoureusement les problèmes d'infinis. Quelques exemples numériques permettent de valider numériquement la méthode, et illustrent la précision des résultats obtenus ainsi que son large domaine d'application.

Le troisième chapitre constitue une mise à l'épreuve de la capacité du modèle scalaire à rendre compte des résultats expérimentaux. À cet effet, et du fait de la géométrie tri-dimensionnelle du pixel réel, nous avons conçu des structures de test spécifiques présentant une direction d'invariance. Ces structures sont de larges photodiodes fabriquées à partir du même procédé que le capteur. Des lignes métalliques de cuivre, dont le rapport de la largeur sur la longueur est négligeable, sont imbriquées dans une couche de cette photodiode. En connaissant précisément les permittivités des matériaux les constituant, ainsi que leur géométrie, nous validons expérimentalement notre méthode de calcul en retrouvant, notamment, l'efficacité quantique de la photodiode en fonction de la longueur d'onde incidente.

Le quatrième chapitre généralise la méthode scalaire du chapitre 2 au cas vectoriel de la diffraction d'une onde plane, d'incidence et de polarisation arbitraire, par un réseau bi-dimensionnel quelconque. Le modèle tri-dimensionnel mis en œuvre est entièrement basé sur les éléments finis d'arête du second ordre. Un calcul d'efficacité de diffraction à partir du champ électrique complexe est établi. Au travers d'exemples numériques variés, nous mettons en exergue le fait que cette méthode permet, sans ajustement particulier là où d'autres approches en nécessitent, de calculer avec précision les efficacités de diffraction résultantes. La convergence et le temps de calcul sont discutés, dans le cas de solveurs directs.

Dans un cinquième chapitre, nous exploitons le modèle 3D à la recherche de réseaux adaptés à la problématique du filtrage colorimétrique dans un pixel CMOS. Plusieurs motifs et matériaux, inspirés de l'étude menée au chapitre 1, sont à l'étude. Un triplet de filtres diffractifs RVB ressort d'une étude paramétrique. Nous en analysons les performances colorimétriques en simulant la reconstruction d'une mire colorée qui serait vue par ce triplet arrangé en motif de Bayer. Ensuite, nous présentons les étapes de fabrication de structures de test munies de la configuration retenue. Il

s'agit de réseaux d'ouvertures annulaires dans une couche d'aluminium, embarqués au dessus d'un pixel CMOS. Enfin, une première réalisation est caractérisée sur le banc de mesure dédié à la caractérisation spectrale d'imageurs CMOS.

Chapitre 1

Contexte : de la miniaturisation du capteur CMOS

Le secteur de l'imagerie numérique représente de gros enjeux en termes de volume de production, d'emploi et de chiffre d'affaire. Deux technologies complémentaires, CMOS et CCD, se partagent le marché.

La technologie des capteurs dits CCD est mûre, car implantée depuis de nombreuses années, et permet d'atteindre de hautes performances optiques, appréciées des domaines professionnels, exigeant une qualité d'image sans compromis. En revanche, son coût élevé, sa consommation électrique et la haute technicité de ses procédés de fabrication remettent en cause son implication dans les domaines à plus forte demande, comme les solutions numériques portatives adressées au grand public.

La technologie CMOS, plus récente, est adaptée aux forts volumes de production et le domaine d'utilisation des capteurs ainsi produits à faible coût, s'est dans un premier temps limité aux applications de bas de gamme telles que les souris optiques, les webcams... Leur architecture leur permet, cependant, une utilisation plus souple et une consommation électrique très inférieure à celle des CCD [3] les prédispose aux applications portables. De plus, grâce aux progrès constants réalisés en finesse de gravure et sur leur architecture, les performances électro-optiques des capteurs CMOS se sont grandement améliorées, si bien qu'ils s'infiltrèrent progressivement dans des domaines d'imagerie de pointe, rivalisant avec les CCD.

Ainsi, depuis leurs débuts poussifs au début des années 1960 sous le nom de scanistors (IBM), on trouve désormais les capteurs CMOS dans de nombreux produits,

fax, scanners, photocopieurs, appareils photographiques (intégrables aux téléphones mobiles, compacts et même réflex, voir Figure 1) et caméscopes numériques pour diverses applications, grand public, imagerie médicale, automobile, aérospatiale, avionique, contrôle de production, sécurité, tri . . .

Le capteur, situé au cœur de l'appareil photographique numérique et remplace la pellicule des appareils argentiques. Divisé en pixels (contraction de l'anglais *Picture Element*, élément d'image) constitués de photodiodes, et pouvant être assimilés au grain d'une pellicule, il échantillonne spatialement le plan image de l'objectif orthogonalement à l'axe de visée, et produit, pour chaque pixel, un signal électronique proportionnel à la quantité de lumière collectée. Les photodiodes sont fabriquées à même le silicium, sous un empilement de couches diélectriques et métalliques liées au procédé de fabrication des transistors CMOS de commande intégrés dans chaque pixel, ce qui impose à la photodiode une surface inférieure à celle de la section du pixel. Afin d'avoir un flux lumineux suffisamment important au niveau de la photodiode, on ajoute une micro-lentille en résine sur la partie supérieure de chaque pixel dans le but de focaliser la lumière au travers des couches. Pour obtenir des imageurs couleur, un motif de Bayer (quadrillage de filtres colorés rouges, verts et bleus) réalisé à partir de résines colorées absorbantes est placé au-dessus de la matrice de pixels, immédiatement sous les micro-lentilles car les résines ne supportent pas les recuits thermiques de passivation. La miniaturisation et l'augmentation de la résolution spatiale du capteur ont été, jusqu'à aujourd'hui, assurées par la réduction de la taille latérale du pixel au fur et à mesure des générations.

Au début des années 2000, le téléphone mobile s'est vu doté de multiples fonctionnalités (dont la capture d'image et de vidéos, visio-conférence. . .) n'ayant pas ou peu de rapport avec son rôle originel et pose aux constructeurs, de ce fait, de véritables défis, notamment en termes d'intégration mécanique, pour ne pas retourner à l'ère du téléphone de taille "transportable". Les volumes de production mis en jeu dans ce secteur sont tels que les constructeurs se sont unanimement tournés vers la technologie CMOS. La fonction d'appareil photographique constitue un véritable casse-tête puisqu'il s'agit de proposer des modules complets de plus en plus *intégrables et performants en termes de qualité d'image*. La résolution des capteurs utilisés dans ces modules photographiques complets augmente donc alors que leur taille diminue conjointement, ce qui impose au pixel des mensurations dans les directions perpendi-

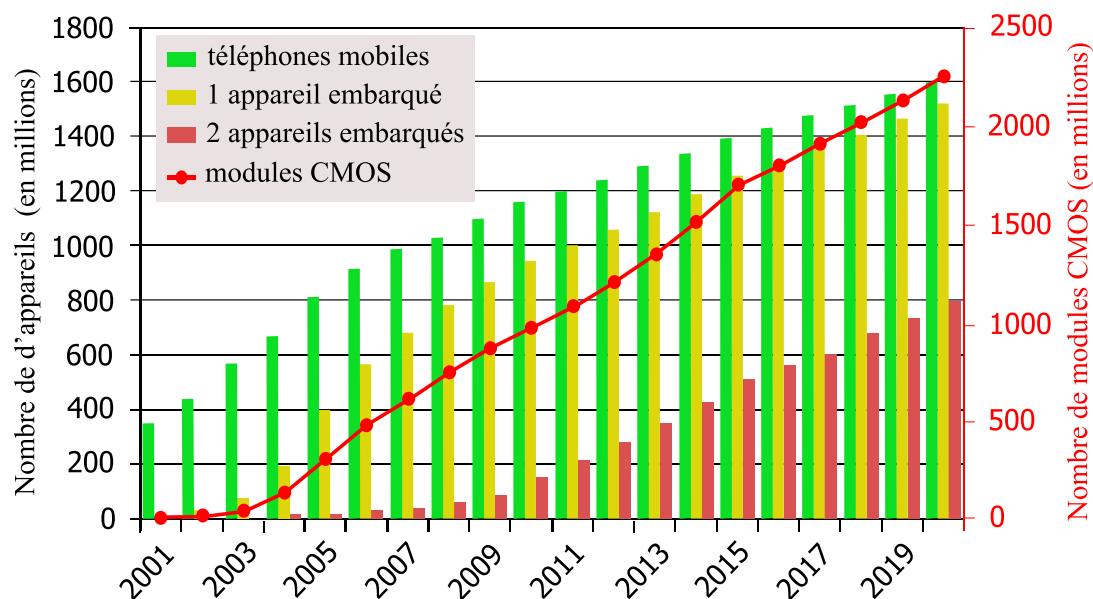


Figure 1: Prévisions de l'évolution du marché des modules photographiques intégrables dans le monde (données STMicroelectronics)

culaires à l'axe de visée de plus en plus petites.

Ce chapitre a pour but de situer, dans un premier temps, le bloc de filtrage couleur et de décrire ses interactions avec le reste de l'architecture du capteur CMOS.

Dans un second temps, les différentes approches, existantes ou en cours de développement, destinées à capter l'information colorimétrique d'une scène dans un imageur seront décrites.

Enfin, les pistes de filtrage spectral diffractif dans le visible seront passées en revue, indépendamment du contexte des imageurs.

1 L'appareil photographique à capteur CMOS

Après un rapide rappel du principe de fonctionnement général du capteur, on se focalisera dans cette partie sur les aspects liés à la propagation de la lumière au sein du pixel, à son filtrage spectral et au traitement numérique de la couleur. Le lecteur pourra trouver en [3, 4, 5] une analyse complète de l'électronique embarquée dans l'imageur CMOS et de ses différences structurelles avec les capteurs CCD.

1.1 Plongée au cœur d'un capteur hautement intégrable

La réduction de la taille de l'appareil photographique complet intégré dans les téléphones mobiles couplée à la course à la résolution maximale a un effet direct sur les dimensions transverses du pixel. Celles-ci décroissent grâce à l'évolution de la technologie CMOS autorisant le dessin de motifs métallo-diélectriques de plus en plus fins. La taille du plus petit motif réalisable en photo-lithographie a en effet diminué en moyenne de trente pour cent par an au cours de ces trente dernières années (loi de Moore [6]).

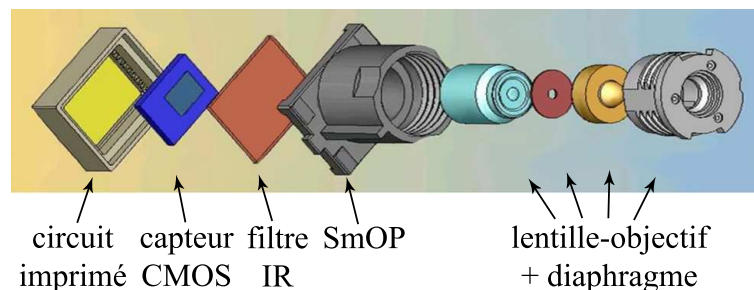


Figure 2: Les éléments macroscopiques du module photographique complet)

La Figure 2 présente une vue éclatée de la structure de l'appareil photographique, représentée assemblée et en coupe en Figure 3. La lumière incidente émanant d'une scène quelconque rencontre successivement les principaux éléments macroscopiques suivants :

- l'objectif, constitué de deux lentilles (voire plus dans le cas du zoom) mobiles si l'appareil est muni de la fonction auto-focus,

- le filtre infra-rouge (IR), destiné à filtrer le proche infra-rouge, collecté par le silicium, mais non visible par l'œil humain (bande 700–1100nm). Il est pour le moment indispensable puisque les filtres couleur laissent passer ces longueurs d'onde. Cet aspect sera détaillé en 1.5.
- le capteur CMOS lui-même, réalisé à partir d'une puce en silicium.
- le boîtier SmOP est le support dans lequel sont intégrés les éléments macroscopiques de l'appareil photographique. Les minuscules dimensions atteintes par le module complet imposent une grande précision sur l'assemblage des éléments optiques, l'objectif et le filtre infra-rouge.

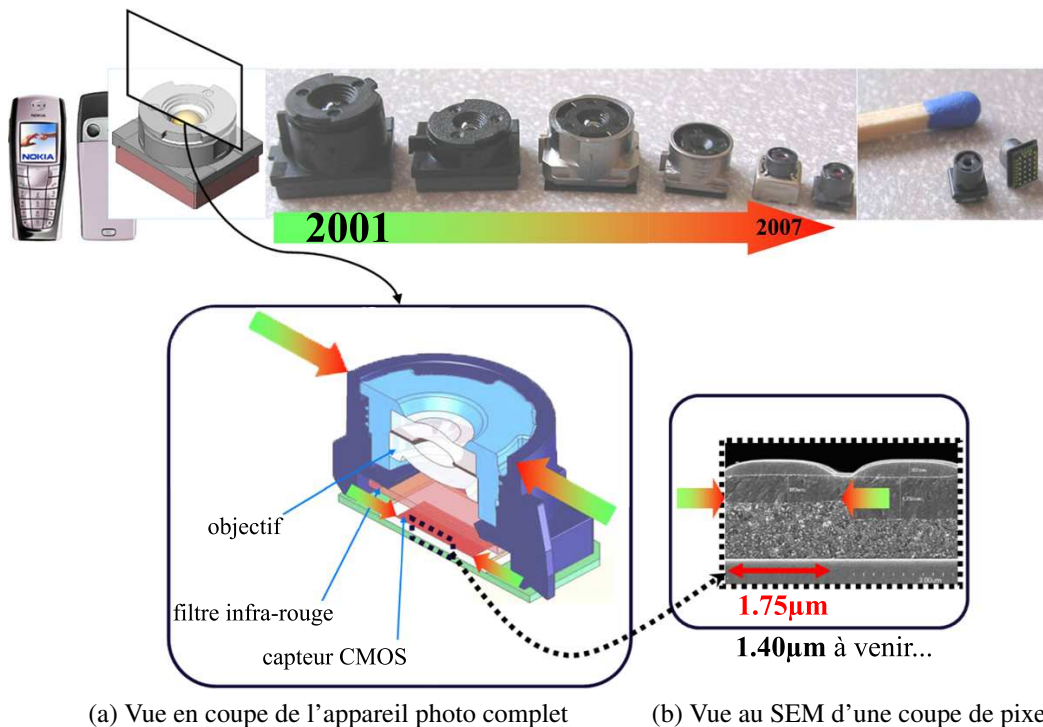


Figure 3: Réduction de la taille du capteur

La Figure 3b est une vue au microscope électronique à balayage (en anglais *Scanning Electron Micrograph*, SEM) d'une coupe de pixel. De nouveau, la lumière transmise par le filtre IR et incidente sur un pixel rencontre successivement :

- une micro-lentille assurant sa focalisation entre les lignes métalliques (aspect détaillé en 1.4),
- un filtre Rouge, Vert ou Bleu (RVB, voir 1.5),

- un empilement métallo-diélectrique (voir 1.4),
- et enfin la photodiode.

1.2 Les problématiques liées à la miniaturisation du capteur

Plusieurs éléments microscopiques constitutifs du pixel limitent sa performance du point de vue optique. Avant d'établir plus précisément le rôle de chacun d'entre eux dans la formation du signal de sortie du capteur, il est crucial de cerner dès à présent ces limitations engendrées par la course effrénée à la miniaturisation.

D'une part, la dimension du pixel selon l'axe de visée devient critique en termes de qualité d'image. En effet, dans un pixel étroit et profond, il est plus probable qu'un photon incident sur un pixel termine sa course dans la photodiode d'un des pixels voisins, dégradant ainsi globalement la résolution de l'image. Ce phénomène est connu sous le nom de diaphotie (ou *crosstalk* en anglais). Les résines constituant les filtres colorés présentent en outre un inconvénient majeur lié au procédé de fabrication CMOS : elles noircissent dès que leur température de dépôt dépasse 200°C, alors que le reste du capteur est élaboré à des températures supérieures à 400°. Elles doivent donc être déposées à la fin du procédé. La distance résultante entre l'opération de filtrage et celle de collection est un facteur propice au phénomène de diaphotie optique. Plus précisément, la présente étude porte sur la possibilité de réduire cette dimension critique en modifiant le bloc en charge du filtrage spectral Rouge Vert Bleu (RVB). En effet, comme détaillé ci-après, ces filtres occupent près de la moitié de l'épaisseur de l'empilement.

De plus, le rôle de focalisation des micro-lentilles est remis en question au fur et à mesure de la diminution de la section du pixel, du fait de l'émergence de la diffraction. Enfin, le filtre infra-rouge est un composant onéreux, fragile et complexe à intégrer dans le boîtier SmOP. Son insertion dans l'empilement parmi les composants microscopiques du capteur CMOS représenterait un gain considérable en termes de facilité d'intégration et de coût.

D'autre part, les méthodes de modélisation des phénomènes de propagation de la lumière reposant sur les approximations de l'optique géométrique ne sont plus applicables dans un pixel dont la section est désormais inférieure à 2 μm . Il est impératif de tenir compte des phénomènes de diffraction et donc de résoudre les équations de

Maxwell de façon rigoureuse dans le pixel. Rappelons, pour l'anecdote, que Maxwell réalisa, en 1861, la première photographie en trichromie, en recombinaison par projection les images d'un objet photographié successivement à travers trois filtres colorés R, V et B. Plus de 150 ans plus tard, on utilise les équations qui portent son nom pour l'étude de la réponse spectrale de capteurs numériques...

1.3 Principe de fonctionnement d'un capteur d'image

Contrairement aux capteurs CCD (Figure 4a) où la réponse de la matrice de pixels est transférée dans sa globalité avant d'être traitée, les pixels des capteurs CMOS (Figure 4b) sont directement adressables. Ceci constitue la différence structurelle entre les

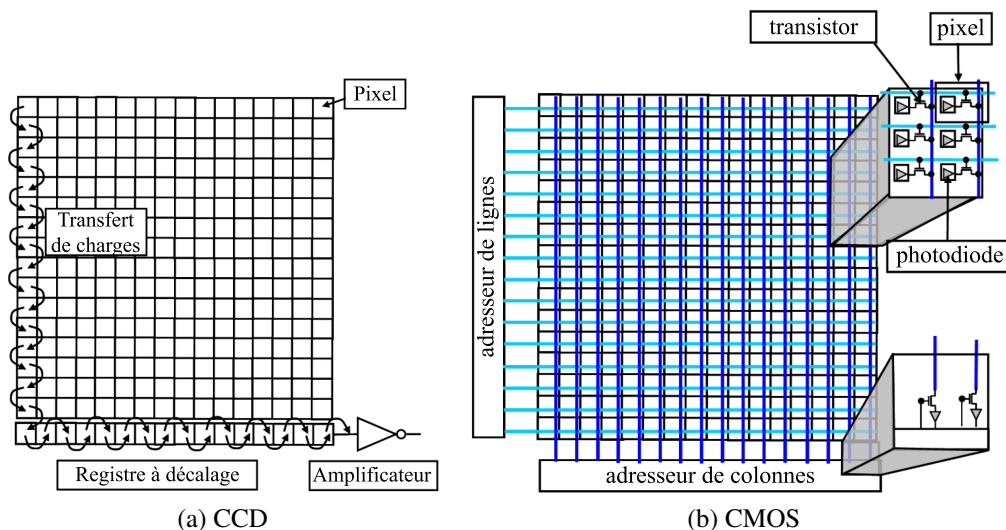


Figure 4: Architecture du capteur CMOS comparée à celle du capteur CCD

deux types de capteurs d'où découlent la plupart de leurs avantages et inconvénients respectifs [7, 8]. En effet, le *facteur de remplissage*, c'est-à-dire le rapport entre la surface effectivement photo-sensible du pixel et sa surface totale, vaut 1 dans le cas du CCD tandis qu'il se trouve fortement réduit dans le cas du CMOS puisque le circuit électronique permettant l'adressage du pixel est construit à même le silicium.

Ce circuit peut être constitué de trois transistors (architecture 3T) par pixel, quatre transistors par pixel (architecture 4T, permettant de réduire le bruit de reset de l'ar-

chitecture 3T) ou encore cinq transistors pour deux pixels voisins (architecture partagée 2T5). D'autres architectures sont disponibles [9], nous n'entrerons pas dans les détails. L'architecture utilisée pour les structures de test lors de ce travail est de type 2T5 partagée. D'un point de vue optique, les pixels ne sont donc pas rigoureusement périodiques comme le montre le schéma issu du logiciel de dessin (en anglais *layout*) des masques CMOS de la Figure 5. En revanche, le groupe constitué par les quatre pixels visibles du schéma est répété périodiquement pour constituer la matrice finale (voir 1.5).

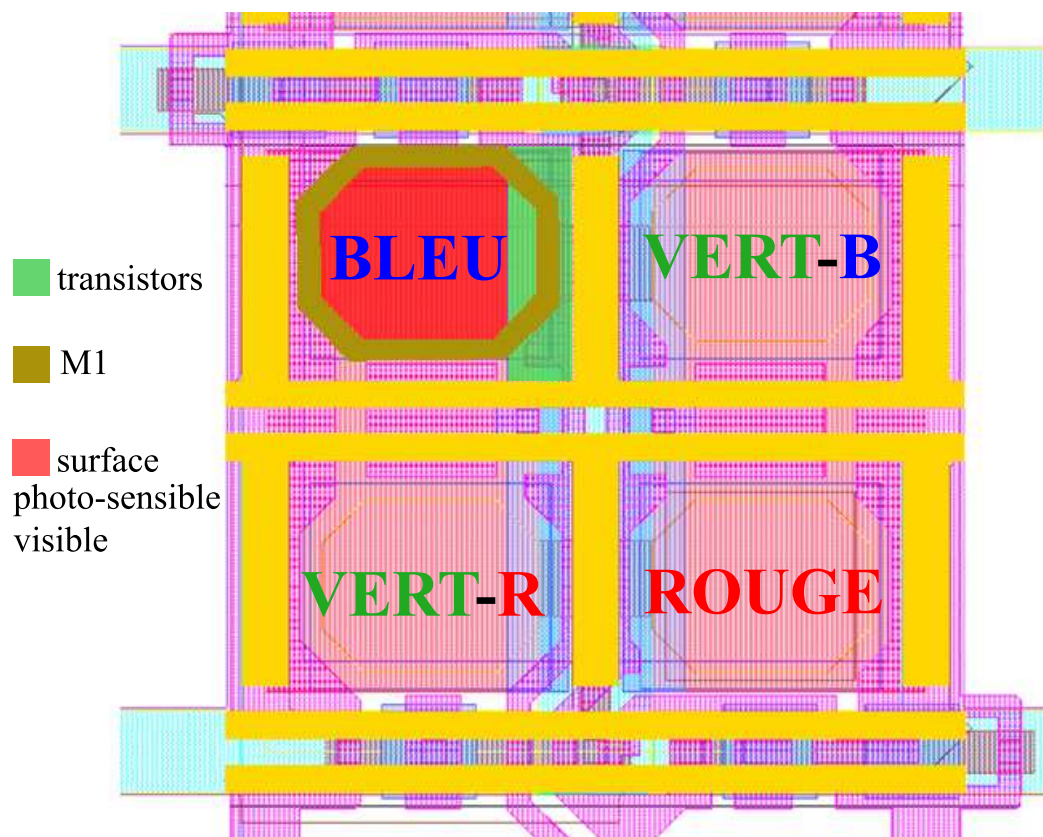


Figure 5: Effet de l'architecture partagée sur la périodicité

1.4 Composition du pixel de capteur CMOS

Les capteurs CMOS de STMicroelectronics sur lesquels nous avons travaillé sont constitués de quatre niveaux de cuivre (cf. Figure 6). Les deux premiers niveaux de

métal, usuellement dénommés M1 et M2, sont dédiés à l'extraction de l'information contenue dans le silicium *i.e.* la lecture du pixel. Concrètement, on trouve donc deux étages de lignes métalliques imbriqués dans un empilement diélectrique au dessus de chaque photo-site qui induisent des ombrages sur le silicium.

C'est pour cette raison qu'ont été introduites les micro-lentilles. Leur foyer est situé au milieu des lignes de cuivre de M1 (cf. Figure 5). Elles ont permis de collecter sensiblement plus de lumière et représentent à ce titre un moyen d'augmenter le facteur de remplissage. Les fabricants de capteurs CMOS ont d'ailleurs unanimement retenu ce procédé. Une seconde micro-lentille [10] peut même être introduite au milieu de l'empilement afin d'améliorer encore la collection. Cependant, dans un contexte où les dimensions du pixel dans les directions orthogonales à l'axe de propagation de la lumière diminuent d'année en année, l'important rôle de focalisation des micro-lentilles s'amointrit du fait de l'apparition de la diffraction. D'autres solutions ont été récemment proposées comme l'utilisation de micro-lentilles diffractives [11].

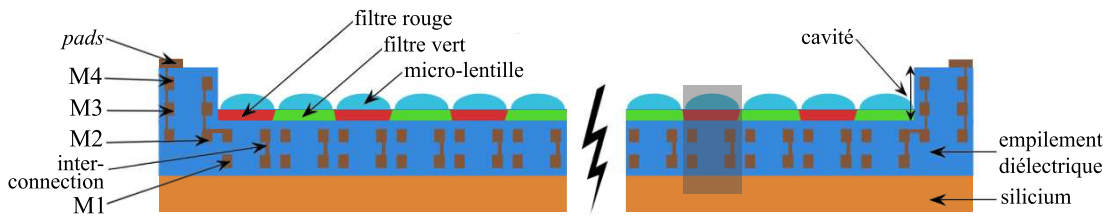


Figure 6: Représentation schématique de la puce (la zone grisée, correspondant à un pixel, sera détaillée Figure 7)

Les niveaux M3 et M4 ont à charge l'acheminement de l'information jusqu'aux bords du capteur de manière à pouvoir connecter la puce dans son boîtier SMOP (en anglais *Small Optical Package*) visible Figure 2. Signalons ici une avancée technologique importante pour la saine propagation de la lumière dans le pixel : la gravure de la cavité. Cette gravure consiste à enlever les diélectriques correspondant à M3 et M4 de la zone du capteur comprenant les pixels (cf. Figure 6). L'empilement ainsi gravé limite les effets interférentiels et la diaphotie optique du fait de la diminution de son épaisseur, comme expliqué en introduction de ce chapitre.

On s'intéresse maintenant à la zone grisée de la Figure 6. On dépose successivement (soit de bas en haut sur la Figure 7) :

- Le silicium dopé : la photodiode (la partie où est effectivement collectée la

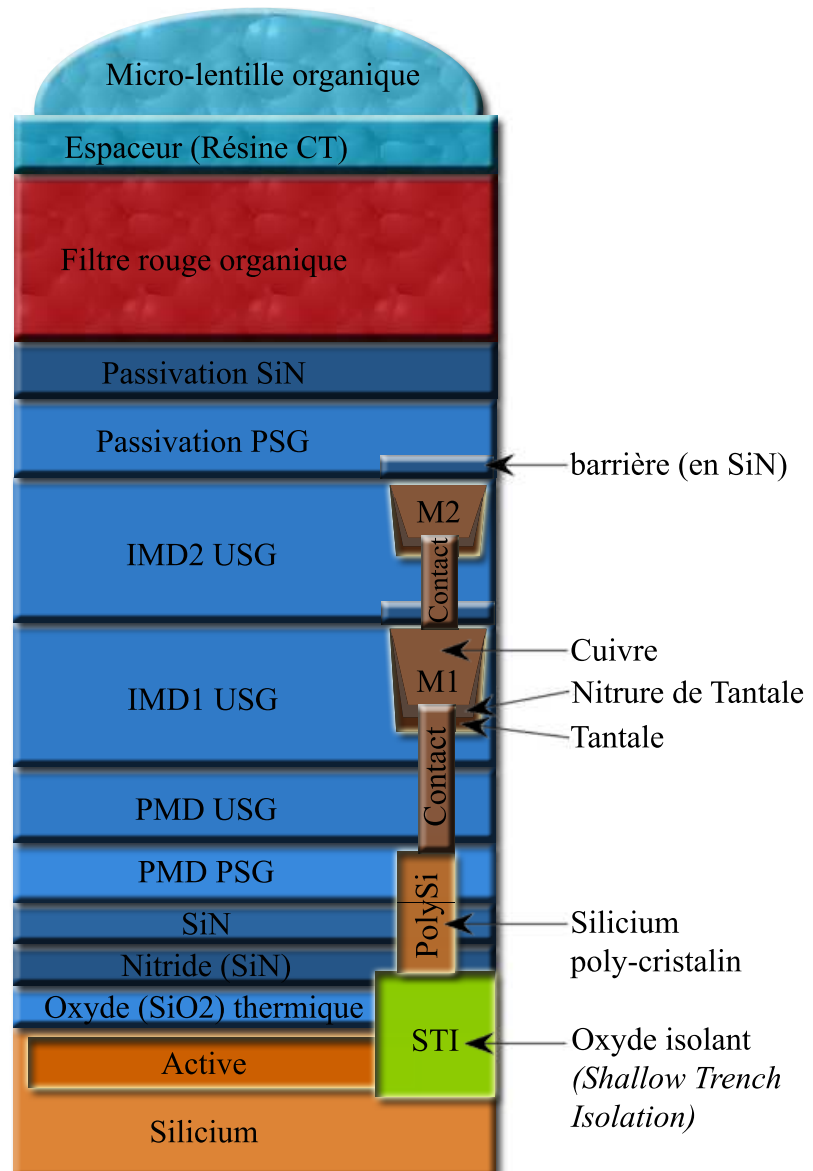


Figure 7: Représentation schématique des matériaux constitutifs du pixel

lumière est appelée *active*) à proprement parler est conçue par étapes de dopage successives à partir d'une plaquette de silicium nue. La présente étude se limitant aux aspects de propagation du flux photonique dans le pixel, la distribution des dopages dans les jonctions et les composants électroniques associés ne seront pas détaillés. Le lecteur peut se reporter par exemple à [12] pour une description approfondie.

- L'empilement métallo-diélectrique : on construit successivement le PMD (en

- anglais *Pre-Metal Dielectric*), constitué d'une couche de PSG (en anglais *Phosphorus Silicate Glass*) et d'une couche d'USG (en anglais *Undoped Silicate Glass*). Viennent ensuite les deux niveaux de métaux (lorsque la cavité est gravée) contenus dans les IMD (en anglais *Inter Metal Dielectric*). Les lignes de cuivre sont confinées dans une barrière de tantale/nitride de tantale et une couche de nitride empêchant la contamination du silicium par électro-migration du cuivre.
- La passivation est destinée à isoler la zone métallo-diélectrique, responsable du bon comportement électrique, des contaminations pouvant survenir lors des étapes de dépôt suivantes.
 - Le filtre couleur rouge, vert ou bleu (R, V ou B, voir partie 1.5) associé à chaque pixel est constitué d'une résine organique absorbante. Son épaisseur fixe donc à la fois la largeur de sa bande passante et son maximum de transmission. Par conséquent, les filtres rouge, vert et bleu n'ont pas la même épaisseur.
 - L'espaceur, ou couche de planarisation, situé au dessus des filtres, constitué de résine (dénommée résine CT) permet d'obtenir une surface plane avant le dépôt des micro-lentilles.
 - La micro-lentille assure la focalisation de la lumière dans la partie photo-sensible du pixel et limite les ombrages dus aux lignes métalliques.

La complexité géométrique des niveaux de métaux et de la photodiode est illustrée par la vue tri-dimensionnelle de la Figure 8.

L'amélioration majeure à apporter à ce procédé de fabrication constitue un axe de développement privilégié pour la plupart des industriels de ce secteur : l'illumination en "face arrière" (en anglais *backside imaging* [13]). Il s'agit de construire la partie métallo-diélectrique sous le silicium comme schématisé en Figure 9 avec les mêmes conventions de couleurs qu'en Figure 7, ce qui permettrait de supprimer tout ombrage métallique. Le principal défi associé à cette technologie en développement à STMicroelectronics est la reprise des contacts en face arrière au moyen de *viae traversantes* (en anglais *Through Silicon Via*, TSV). Il faut donc construire ces photo-sites à partir d'une plaquette de silicium amincie, puis traverser le silicium sur ses 50µm d'épaisseur pour pouvoir mesurer le potentiel au nœud de lecture comme sur un capteur classique. Le reste de l'empilement dédié à l'extraction de l'information est construit comme pour un imageur "face avant" classique. La société OmniVision a commercialisé en 2008 le premier modèle de cette génération émergente.

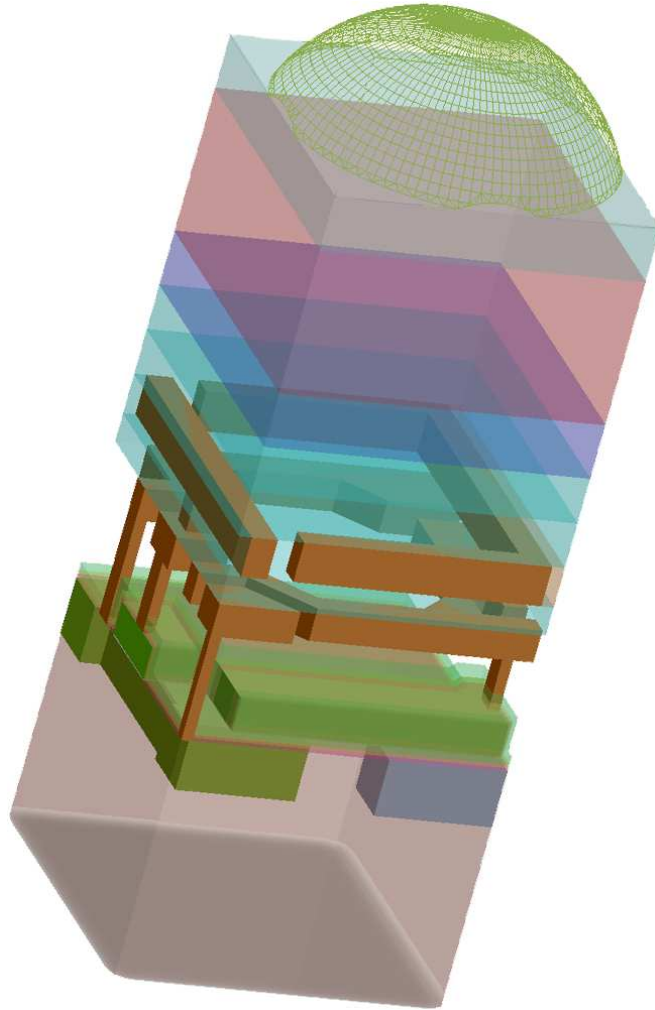


Figure 8: Vue 3D du pixel (les zones orangées représentent M1, M2 et les interconnexions entre ces niveaux)

1.5 Principe de restitution de la couleur utilisé

Comme il sera discuté dans la partie suivante, il existe de multiples manières de capter l'information colorimétrique contenue dans une scène. Cette partie s'attache à décrire le principe majoritairement utilisé dans les capteurs dédiés à la photographie numérique. Cette méthode [2] repose sur le principe de la synthèse additive de la couleur dans l'espace RVB et se compose de deux étapes :

- *Filtrage physique de la couleur* : chaque pixel est recouvert d'une résine (Figure 10) élaborée à partir de pigments ou colorants dispersifs constituant un filtre par absorption. Ces résines, dont les spectres de transmission sont donc fixés par

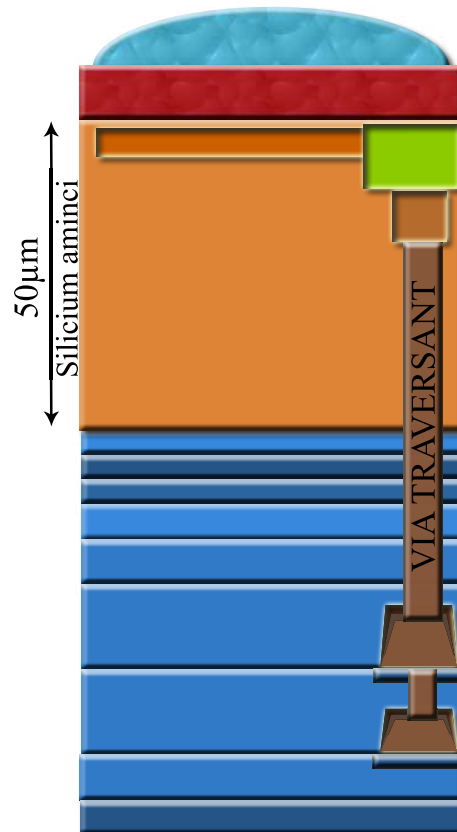


Figure 9: Principe de l'illumination face arrière

leurs épaisseurs respectives, sont disposées selon un arrangement dit de *Bayer*. C'est notamment pour cette raison qu'il est impossible de réunir les opérations de filtrage et de focalisation en concevant des micro-lentilles colorées : les pieds desdites lentilles seraient de faible épaisseur et laisseraient passer la lumière blanche. Les résines bleue et verte sont passe-bandes en longueur d'onde dans le visible mais leur transmission remonte dans le proche infra-rouge (voir Figure 11), tandis que la résine rouge constitue un filtre passe-haut. Le silicium étant photo-sensible de 400 à 1050 nm, il est impératif de filtrer la composante proche infra-rouge 700-1100 nm au préalable. Ceci est généralement réalisé au moyen d'un filtre interférentiel, comprenant une trentaine de couches, intégré mécaniquement dans le boîtier SmOP.

- *Post-traitement numérique* : cette étape se compose de plusieurs ajustements des composantes couleurs RVB, physiquement filtrées (interpolation, balance

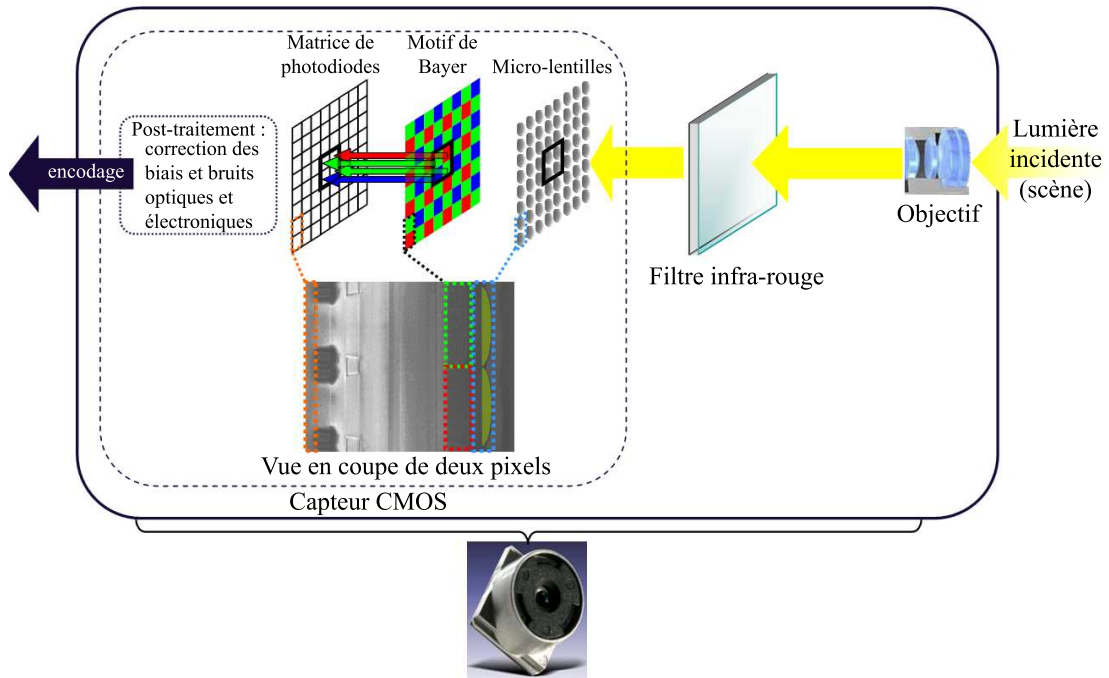


Figure 10: Mise en évidence des deux étapes de filtrage de la couleur

des blancs et correction des couleurs, décrits ci-après), ainsi que d'opérations de filtrage du bruit électronique.

Les résines colorées organiques permettent un filtrage physique des couleurs adapté à l'espace couleur RVB, grâce aux propriétés suivantes :

- des profils spectraux en transmission passe-bandes pour les résines B et V (cf. 11)
- des maxima en transmission élevés (de 70 à 80% du flux incident, lorsqu'elles sont déposées sur verre)
- un spectre en transmission assez indépendant de l'angle d'incidence de la lumière jusqu'à 30°
- les pieds des spectres se recoupent (voir 11)) à 50% de transmission, propriété indispensable à l'opération de correction des couleurs.

Néanmoins certains aspects, liés à l'utilisation de ces résines, limitent la performance du capteur d'un point de vue optique :

- Leur épaisseur : celle de l'empilement diélectrique a été réduite grâce à la gravure de la cavité à 1 μm environ. Suivant la couleur considérée, celle des résines vaut entre 800 nm et 1 μm . Les résines colorées sont donc responsables de la

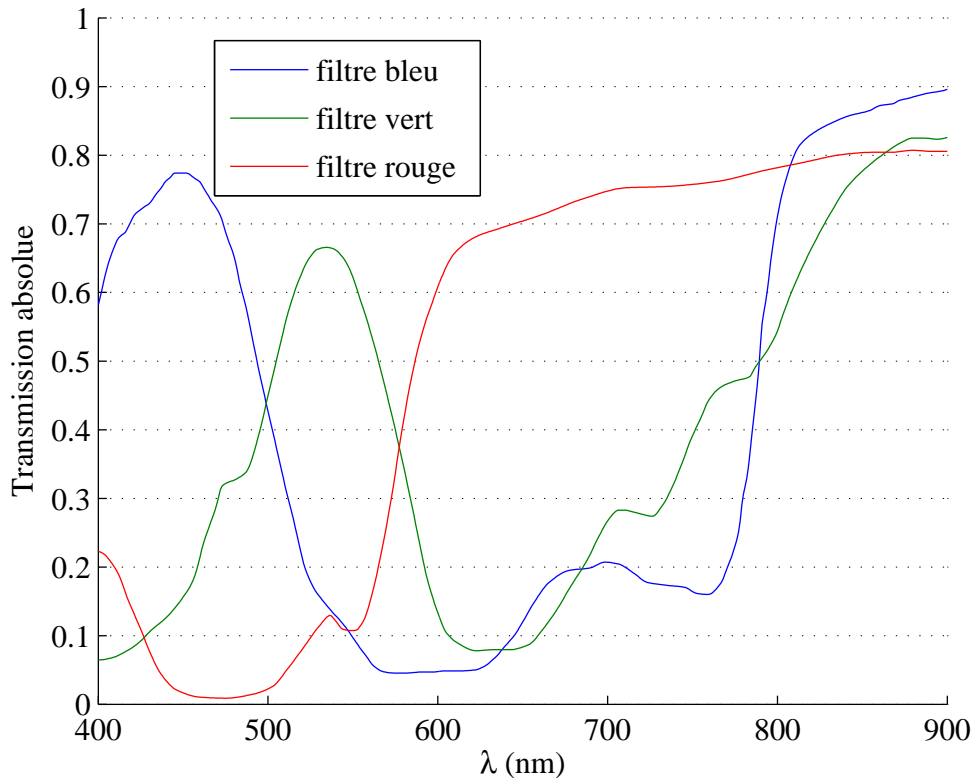


Figure 11: Spectres de transmission mesurés des filtres colorés (dépôt de $1\mu\text{m}$ de résine sur 1mm de silice)

moitié de l'épaisseur totale de l'empilement.

- Leur sensibilité aux traitements thermiques lors d'un dépôt à haute température : au delà de 200° , ces résines fluent ou noircissent [14]. Toutes les couches diélectriques déposées entre le silicium et la passivation étant déposées à des températures supérieures à 400° , il n'y a technologiquement aucune liberté de position pour ces résines. Pourtant, leur positionnement au plus proche du silicium réduirait significativement la diaphotie.
- Leur vieillissement : soumises à de fortes illuminations ou de fortes températures, ces résines vieillissent mal. Leur profil spectral en transmission s'en trouve modifié au fur et à mesure du temps. Il en résulte des images aux couleurs de moins en moins proches de la scène photographiée.

Signalons qu'une étude [15] est en cours à STMicroelectronics pour pallier à ces problèmes. Il s'agit de concevoir des filtres non plus organiques mais minéraux qui per-

mettraient de modifier l'empilement en rapprochant considérablement les filtres du silicium, leur résistance en température étant bien meilleure (cf. Figure 12).

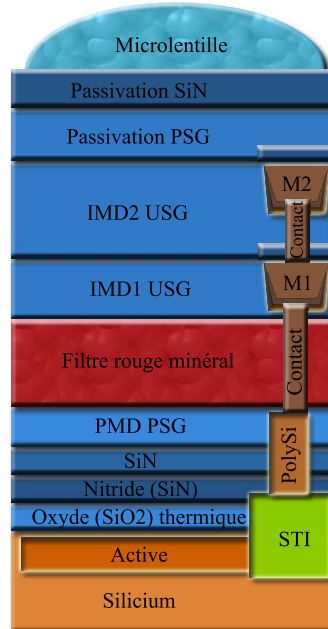


Figure 12: Situation possible dans l'empilement d'un filtre coloré minéral résistant aux recuits

1.5.1 Interpolation des couleurs

La Figure 13 montre l'arrangement original des filtres RGB conçu par B. Bayer [2]. Le fait de choisir deux pixels verts pour un couple bleu et rouge est inspiré de l'œil humain plus sensible dans le vert [16]. Chaque pixel capte physiquement une seule des trois composantes R, V ou B. Les deux autres composantes sont interpolées en moyennant les composantes physiquement filtrées par ses plus proches voisins. Il est à noter que cet arrangement géométrique des filtres n'est pas le seul possible [17, 18]. De même, la technique d'interpolation, baptisée démosaïçage, a fait l'objet à de nombreuses études [19]. Enfin, comme pour les objectifs optiques, on peut définir une Fonction de Transfert de Modulation (FTM [20]) pour qualifier la résolution d'un capteur. Sur ce même modèle, en considérant chaque plan couleur, on définit aussi une FTM pour chaque plan couleur. Avec le motif de Bayer classique, on notera une meilleure FTM dans le vert que dans les autres couleurs, cette couleur étant moins interpolée que les deux

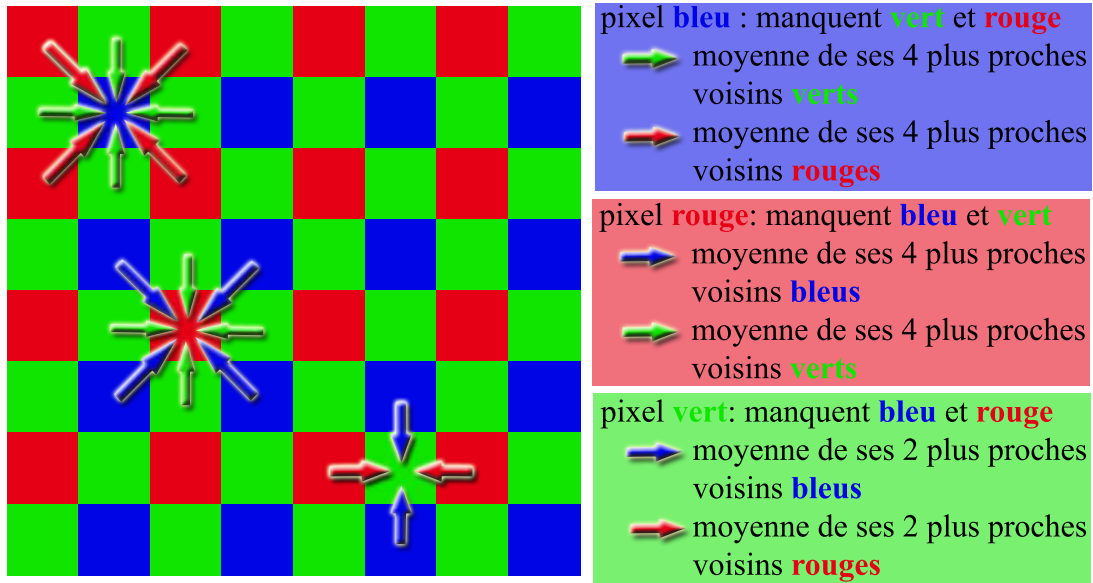


Figure 13: Principe d'interpolation des couleurs lors du filtrage colorimétrique de Bayer

autres lors de l'opération de démosaïçage. Il résulte de cette opération d'interpolation l'attribution à chaque pixel d'un vecteur couleur à trois composantes R, V et B, qu'on note $\mathbf{C}^{\text{interp}}$.

1.5.2 Balance des blancs

Une fois les trois plans couleurs séparés, il faut équilibrer la *balance des blancs* : la perception du blanc dépend du spectre de l'illuminant (jour, lampe, flash ...) de la scène observée. En conséquence, les rapports des différentes intensités des pixels bleus, verts et rouges doivent rester les mêmes lorsqu'on acquiert l'image d'une scène blanche. Effectuer la balance des blancs consiste donc à multiplier $\mathbf{C}^{\text{interp}}$ par une matrice diagonale équilibrant ainsi les trois composantes indépendamment les unes des autres :

$$\mathbf{C}^{\text{BB}} = \begin{bmatrix} r & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix} \mathbf{C}^{\text{interp}} \quad (1.1)$$

1.5.3 Correction des couleurs

Avant d'obtenir le signal vidéo final, les couleurs doivent être corrigées. Cette opération, conservant la balance des blancs précédemment établie, consiste à corriger les trois coefficients pour que les couleurs du signal vidéo émis par le capteur soient les plus proches possible des couleurs normalisées établies par les normes CIE (Commission Internationale de l'Éclairage). Cela est indispensable à leur saine restitution lors de l'impression ou de l'affichage sur un écran lui-même calibré sur les points de référence fixés par la CIE. Pour cela, on réalise de légers mélanges entre les trois couleurs balancées pour obtenir \mathbf{C}^{cor} correspondant aux couleurs du signal final :

$$\mathbf{C}^{\text{cor}} = \begin{bmatrix} r_R & r_V & r_B \\ v_R & v_V & v_B \\ b_R & b_V & b_B \end{bmatrix} \mathbf{C}^{\text{BB}} \quad (1.2)$$

La somme des termes de chaque ligne est imposée égale à 1, de sorte que la balance des blancs n'est pas modifiée. Les coefficients r_V , r_B , v_R , v_B , b_R et b_V doivent être petits devant les coefficients diagonaux. Une correction hors diagonales trop importante signifie en effet que les résines employées ne sont pas adaptées à l'espace couleur choisi. Nous illustrerons concrètement ces aspects de balance des blancs et de correction des couleurs au chapitre 5.

2 Les méthodes de filtrage colorimétrique alternatives existantes

2.1 Solutions commercialisées

Le choix de l'espace couleur RGB et de la synthèse additive des couleurs a été adopté par la plupart des fabricants. Cependant, plusieurs solutions alternatives ont été mises en œuvre et certaines d'entre elles sont toujours commercialisées à ce jour.

Des motifs plus simples existent, mais conduisent à une FTM par plan couleur moins bonne qu'avec un motif de Bayer (par exemple le motif colonne, Figure 14b, ou diagonal, Figure 14c) ou à des opérations de démosaïçage plus complexes (Figures 14d et 14e). D'autres arrangements ont été également étudiés [18].

Le fabricant Sony a lancé en 2003 un capteur CCD muni d'un motif de Bayer modifié : la moitié des filtres verts est remplacée par des filtres émeraude (RVBE, Figure 14f). Ces capteurs ont rapidement disparu du marché. Le profil spectral en transmission des filtres émeraude s'est avéré moins reproductible que pour les trois couleurs classiques.

Nikon Corporation proposait notamment jusque récemment une reconstruction de la couleur à partir d'un filtrage physique des couleurs complémentaires Cyan, Jaune, Magenta et Vert (CJMV, Figure 14g). La synthèse additive de ces couleurs donnerait un rendu brut globalement plus terne qu'en utilisant les couleurs primaires RVB [21].

Fuji a choisi de scinder chaque photo-site en deux éléments de taille différente (cf. Figure 14h). Le pixel principal a une forme octogonale, mais présente une géométrie légèrement aplatie qui libère assez d'espace pour intégrer un second pixel de taille réduite. Celui-ci est chargé d'enregistrer une valeur sous-exposée par rapport à celle mémorisée par le pixel principal. La combinaison des deux informations permet d'étendre la dynamique du capteur.

Le filtrage *panchromatique* est très en vogue depuis mi-2007. Il consiste en une évolution du motif de Bayer avec un pixel laissé sans aucun filtre (Figure 14i). Ce type de capteur permettrait une balance des blancs automatique de meilleure qualité qu'actuellement. Aucun produit n'est encore sorti mais une vingtaine de brevets sont en cours notamment chez le fabricant Eastman Kodak [22].

Citons enfin une alternative proposée par Foveon (modèle X3, Figure 15a), intéressante puisqu'elle permet d'obtenir les informations RVB physiquement pour chaque pixel. La FTM est par conséquent la même dans chaque plan couleur et cette technique facilite en théorie grandement le démosaïçage. De plus, tout le flux lumineux incident est exploité. Elle repose sur le principe qu'un photon à 450 nm est absorbé juste après son entrée dans le silicium, alors qu'un photon moins énergétique, à 650 nm, n'est absorbé qu'entre 2 et 3 μm après son entrée dans la photodiode. Les fabricants du X3 ont donc pensé [23] à construire trois jonctions PN superposées, chacune étant sensée collecter, dans le sens de propagation de la lumière, B, V ou R respectivement. Ce type de capteur présente cependant l'inconvénient d'être très peu sensible dans le bleu. En effet, cette couleur correspond à des paires électron-trou générées à quelques dizaines de nanomètres de l'interface entre le silicium et la silice thermique (voir Figure 7). Il est fort complexe de réaliser une jonction pour les collecter du fait

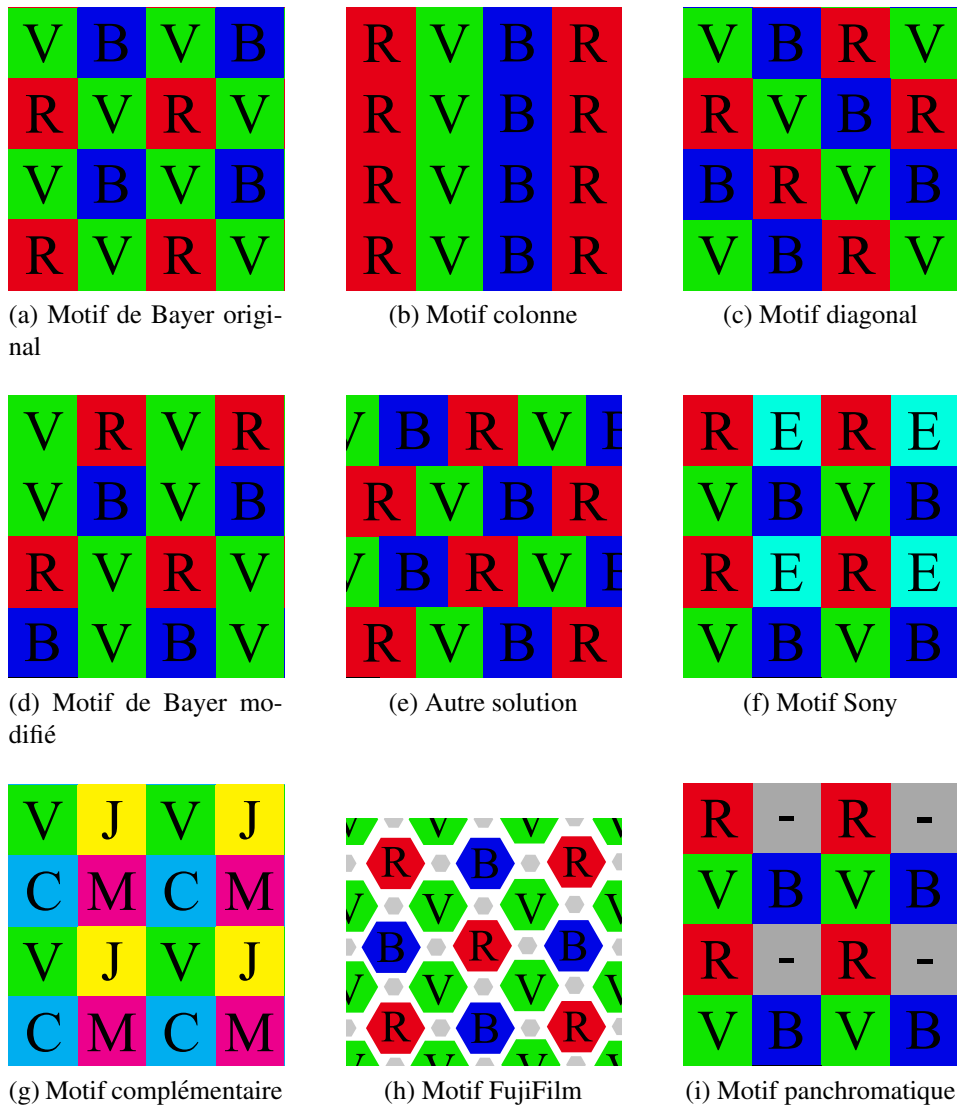


Figure 14: Alternatives existantes au motif de Bayer

de l'influence de la recombinaison des porteurs sur l'interface. Cette structure permet pourtant, théoriquement, d'obtenir, avec un unique capteur, les mêmes opérations de démosaïçage simples qu'avec un tri-CCD (Figure 15b), pour lequel le flux issu de l'objectif est équitablement réparti en trois faisceaux par un jeu de prismes et projeté sur trois capteurs distincts. Les FTM par plan couleur résultantes sont identiques.

En 2006, Nikon a breveté une technologie utilisant des miroirs dichroïques [24] afin d'égaliser, avec un unique CCD, les performances incontestables de la technologie

tri-CCD, très onéreuse. Le pixel (Figure 15c) est alors constitué d'une micro-lentille, d'un jeu de trois miroirs dichroïques et de trois photo-sites. Comme pour un tri-CCD ou un Foveon, chaque pixel dispose donc de chaque composante R, V et B physiquement filtrée. De plus, la sensibilité de ce type de capteur devrait être accrue par rapport aux technologies utilisant des filtres par absorption puisque tout le flux lumineux incident est exploité. Les difficultés de fabrication sont cependant importantes et les pixels doivent être de grande taille pour accueillir leurs trois photo-sites.

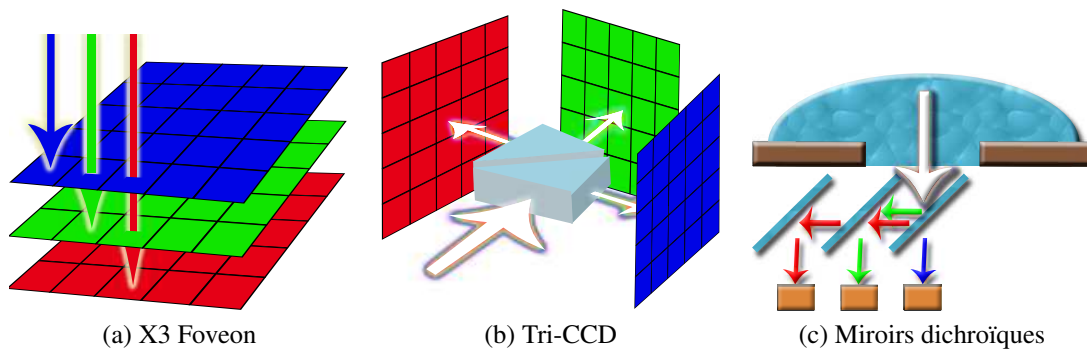


Figure 15: Alternatives existantes au filtrage par résines absorbantes

2.2 Solutions interférentielles potentielles

Les solutions alternatives au procédé de filtrage classique présentées ci-après ne sont pas encore commercialisées. Elles représentent un ensemble de pistes sur lesquelles il faudra compter à l'avenir.

Inaba *et al.* ont exploré les possibilités de remplacer les résines absorbantes du motif de Bayer classique, par des filtres interférentiels constitués d'un empilement de huit couches minces en alternant entre matériaux à haut (TiO_2) et bas (SiO_2) indice [25], comme schématisé en Figure 16. Cette équipe a considéré ces matériaux sans pertes et non dispersifs avec $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$ et $n_{\text{TiO}_2} = 2.51$ sur toute la plage spectrale du visible.

L'Efficacité Quantique (en anglais *Quantum Efficiency*, QE) d'un photo-détecteur est définie comme le rapport entre le nombre d'électrons collectés et le nombre de photons incidents. Nous avons numériquement placé les filtres d'Inaba *et al.* au dessus de notre empilement (sans prendre en compte les métaux ni la micro-lentille, reste

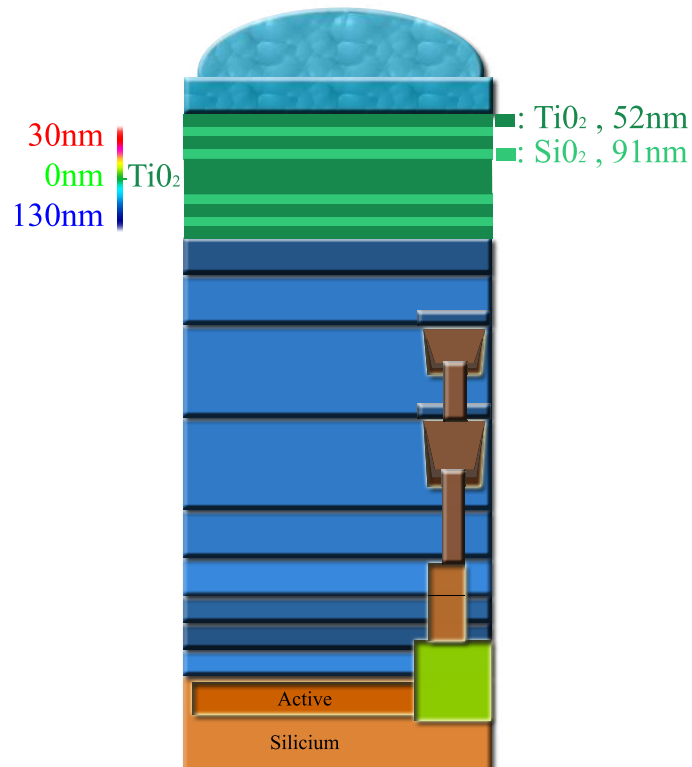


Figure 16: Filtrage interférentiel

donc un multi-couches classique) et nous avons comparé les niveaux de QE ainsi obtenus (voir, au chapitre 2, les parties 2.2 pour le calcul de cette grandeur et 1.4 pour le calcul couches minces) avec ceux qui seraient obtenus avec les résines colorées de STMicroelectronics (cf. Figure 17).

Les profils spectraux obtenus pourraient être optimisés de manière à ce que le filtre bleu ait une bande passante plus large. En effet, les points de recoupement des pieds des spectres ont aussi leur importance pour le démosaïçage, lors de l'opération de correction des couleurs (termes non diagonaux, Éq. 1.2). Les maxima atteints sont même supérieurs à ceux obtenus avec des résines colorées. Dans le vert, on atteint 0.98 de QE avec les couches minces contre 0.82 avec les résines (cette grandeur a un maximum théorique de 1).

La mise en pratique de cette solution en technologie CMOS présente un inconvénient de taille. Les filtres interférentiels nécessitent un contrôle très précis de l'épaisseur

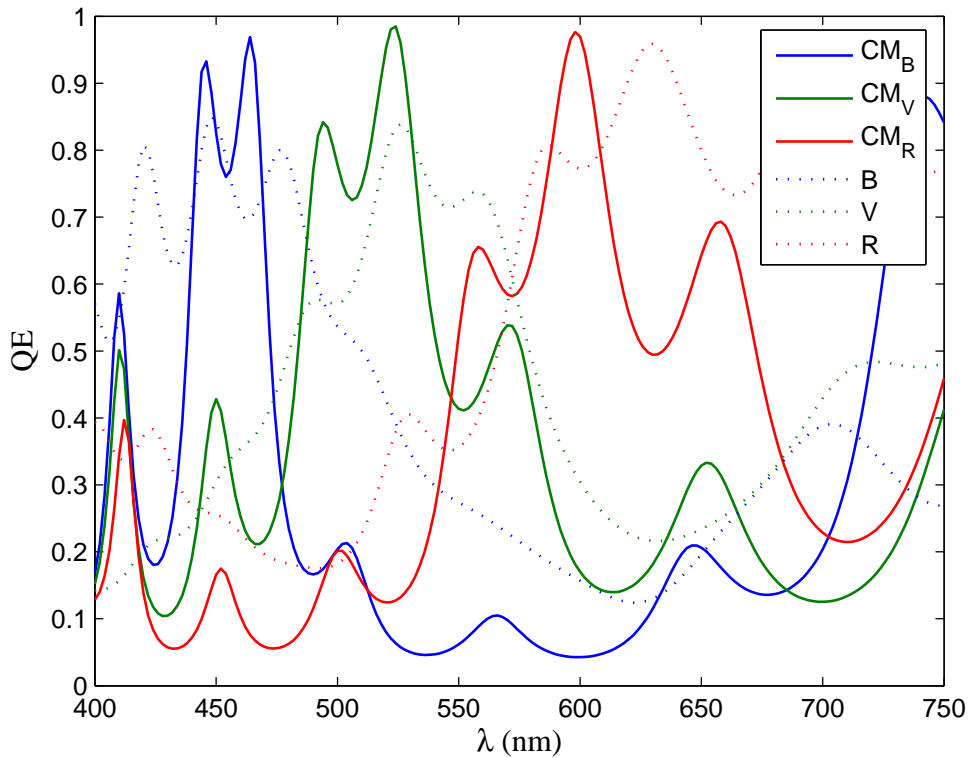


Figure 17: Réponse calculée pour les trois filtres Couches Minces (CM, en trait plein) comparée à celle des résines actuelles (en pointillés) sur un même empilement diélectrique déposé sur silicium

optique de chaque couche (produit de leur indice et de leur épaisseur physique), souvent contrôlée *in situ*, en cours de dépôt. Or, le procédé de fabrication CMOS est plus approximatif sur l'épaisseur des couches déposées que les procédés de dépôt traditionnels en couches minces. L'erreur potentielle lors du dépôt d'une couche y est en effet estimée à $\pm 15\text{--}20\%$ de l'épaisseur physique de consigne. Les barres d'erreur de la Figure 18 illustrent les effets de ce phénomène sur le profil spectral en transmission du filtre rouge en réalisant vingt dépôts virtuels avec une épaisseur e de chaque couche de l'empilement choisie aléatoirement dans l'intervalle $[e - 0.15e, e + 0.15e]$. Le QE moyen obtenu après ces vingt essais est représenté en trait plein sur cette figure, les barres d'erreurs affichées pour chaque point calculé montrent l'importance des écarts obtenus. Les précisions des méthodes de dépôt utilisées en CMOS s'affineront cepen-

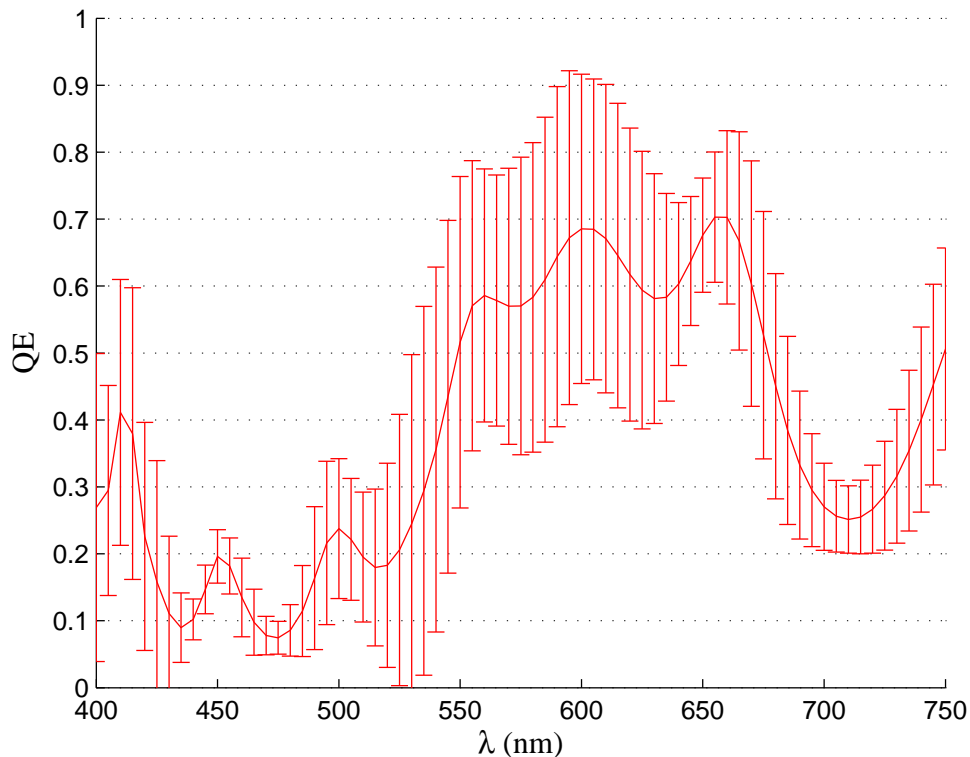


Figure 18: Décalage possible du spectre en transmission de l'empilement dû aux incertitudes de dépôt

dant et cette technique de filtrage pourrait être très performante, à condition de d'utiliser un contrôle de l'épaisseur optique *in situ*. Par ce fait, elle reste peu compatible avec un procédé qui se veut *bas-coût*.

Enfin, un second inconvénient majeur associé à ce procédé de filtrage est l'influence de l'angle d'incidence, qui est susceptible de varier de 30° par rapport à la direction de visée.

Koyama *et al.* [26] ont aussi décliné cette méthode reposant sur l'utilisation de filtres interférentiels, disposés en un motif de Bayer modifié (Figure 19b) : un des deux pixels verts ne collecte que la bande du proche infrarouge. Le grand avantage de cette méthode réside dans le fait qu'elle dispense d'utiliser un filtre infra-rouge. En effet, les composantes R, V ou B de chaque pixel sont obtenues alors en soustrayant les composantes IR voisines, moyennées, à la réponse R+IR, V+IR ou B+IR, physique-

ment filtrée. Enfin, cette idée permettrait d'obtenir un *mode nuit* en utilisant seulement les composantes IR.

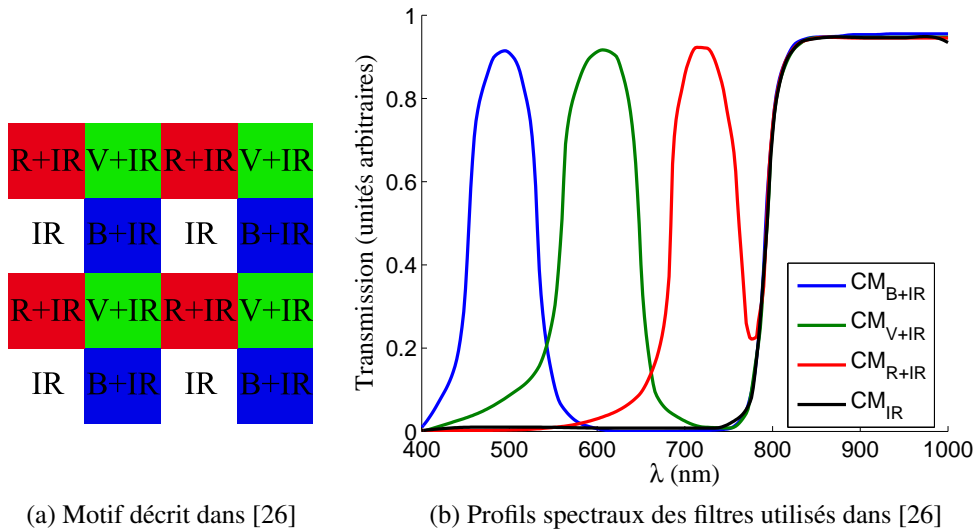


Figure 19: Arrangement et profils spectraux de filtres permettant de se passer de filtre IR et de disposer d'un *mode nuit*

3 Filtrage diffractif

Après avoir montré les avantages et les limitations des techniques de filtrage par absorption et par interférences, cette partie porte sur le filtrage diffractif dans le visible, indépendamment du contexte des imageurs CMOS. Cette méthode de filtrage est largement utilisée dans les domaines mettant en jeu de plus grandes longueurs d'onde que celles du visible comme les micro-ondes. En effet, on est, seulement depuis peu, capable de réaliser des motifs diffractifs avec une bi-périodicité inférieure aux longueurs d'onde du visible, structures qui présentent des interactions particulières avec la lumière. Le domaine d'utilisation des FSS (en anglais *Frequency Selective Surface* [27]) s'étend donc de plus en plus vers les courtes longueurs d'onde (on peut se référer à [28] pour des réalisations dans l'IR, à [29] ou [30] pour le proche IR et enfin à [31] pour le visible).

3.1 La Nature...

Dame Nature n'a pas attendu la découverte des procédés de nano-fabrication pour "concevoir" ce type de structures périodiques sub-longueur d'onde. Les structures présentées ci-après ont été mises en évidence au début des années 1940 [32], mais il a fallu attendre la théorie électromagnétique des réseaux pour comprendre véritablement [33] le comportement de la lumière les traversant ou s'y réfléchissant. En piégeant certaines longueurs d'ondes plutôt que d'autres, elles constituent des filtres diffractifs naturels.

Ainsi, le papillon d'Amérique du Sud *Morpho rhetenor*, d'un bleu irisé, doit ses couleurs aux nano-structures (Figure 20b) présentes sur ses ailes pourtant assimilables à un matériau transparent. Les irisations proviennent de la sélectivité angulaire du réseau. En 2007, Gralack *et al.* ont reconstruit ces couleurs à partir de simulations électromagnétiques rigoureuses [33]. Les couleurs des ailes de ses congénères, vivant sous nos latitudes, s'expliquent généralement par la présence de pigments colorés.

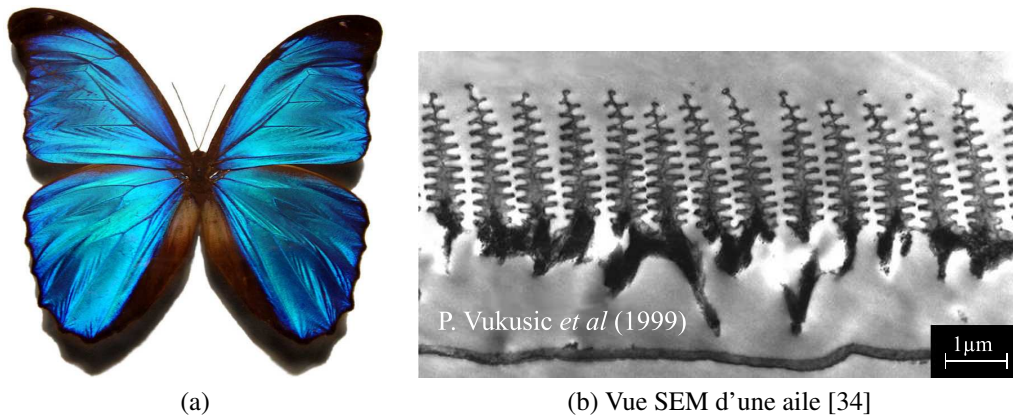


Figure 20: Le papillon *Morpho rhetenor*

En 2008, Xie *et al.* ont expliqué, d'un point de vue électromagnétique, comment les cigales se "camoufflent" [35]. Outre le fait que la couleur de leur corps se marie harmonieusement avec leur environnement végétal, leurs ailes sont nano-structurées (Figure 21b) pour former un anti-reflet efficace. Leur ailes se "voient" donc moins que celles, diffusantes, d'une mouche par exemple. La forme de ces motifs a d'ailleurs inspiré la conception de surfaces anti-réfléchissantes dans le domaine des capteurs solaires [36].

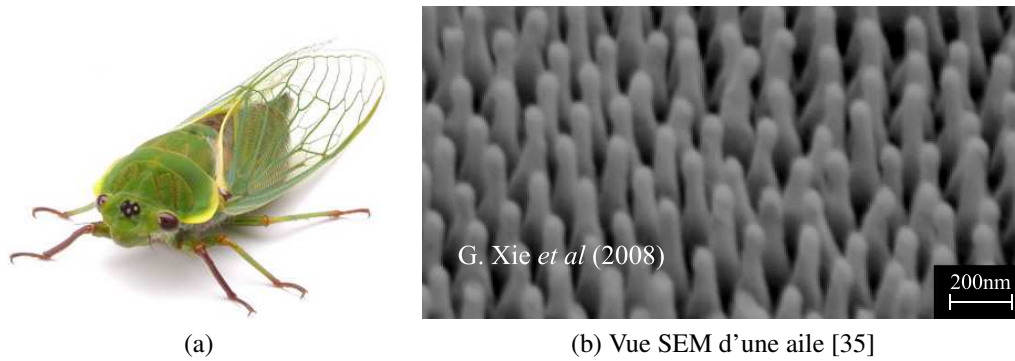
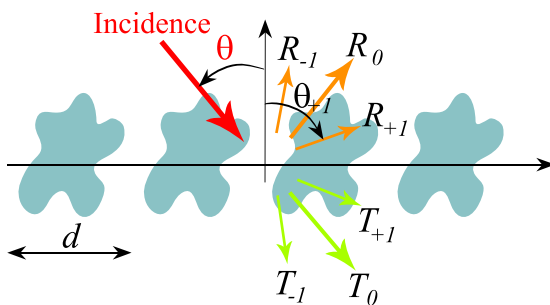


Figure 21: L'anti-reflet des ailes de cigales

3.2 ...imitée par l'Homme

3.2.1 Réseaux et couleur

De manière générale, les réseaux de diffraction mono-dimensionnels sont constitués d'un très grand nombre de traits équidistants et parallèles, et séparent un faisceau monochromatique incident en plusieurs faisceaux, dits ordres de diffraction transmis et réfléchis. Les directions privilégiées sont données par la formule des réseaux de l'optique géométrique :



$$k \sin \theta_n = k \sin \theta + \frac{n}{d} \quad (1.3)$$

où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est la constante de propagation et d la période du réseau (cf. Figure 22).

Figure 22: Réseau de diffraction

Les réseaux de diffraction ont donc une nature dispersive, leur réponse (soit le nombre d'ordres *propagatifs*, les *directions* et *efficacités* associées à ces ordres) étant dépendante de la longueur d'onde incidente, à paramètres opto-géométriques fixés. Les efficacités des ordres de diffraction résultent des interférences produites par les contributions cohérentes diffusées par chaque motif. Leur détermination précise passe

par la prise en compte du caractère vectoriel de la lumière et des équations de Maxwell. Lorsque la période d est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, l'énergie incidente est répartie dans les ordres de diffraction dans des quantités *très sensibles à la polarisation incidente*. La polarisation de lumière diffusée par une scène quelconque pouvant être considérée comme une superposition de toutes les directions possibles de polarisation, l'utilisation de réseaux sub-longueur d'onde mono-dimensionnels pour le filtrage couleur est fortement compromise.

Les réseaux dits séparateurs de couleur en transmission (en anglais *Color Separation Gratings*, CSG), introduits par Damman en 1978 [37] exploitent par exemple le caractère dispersif angulaire de réseaux de diffraction diélectriques *en escaliers* (cf. Figure 23a). Leur période, typiquement de 20λ [38] les prémunit des effets néfastes de la polarisation incidente et les classe dans la gamme des éléments dits de *micro-optique*. Farn *et al.* ont établi les caractéristiques d'un tel réseau monté sur micro-lentille [39]. Layet *et al.* [40] (puis Tossavainen *et al.* [41] en 2006 en faisant varier le pas d du réseau) ont récemment repris ce principe qui laisse entrevoir la possibilité de concevoir un arrangement pour les filtres colorés de type colonne, comme celui de la Figure 14b, adaptable aux capteurs (et aux écrans) numériques. Mais, comme vu précédemment, les FTM par plan couleur résultant de motifs colonnes restent inférieures à celles résultant d'un motif de Bayer par exemple. De plus, les pixels de section inférieure à $2\mu\text{m}$ rendent difficile l'utilisation des CSG mono-dimensionnels, puisque leurs périodes seraient proches des longueurs d'onde du visible. En 1979, Knop a montré, grâce à la

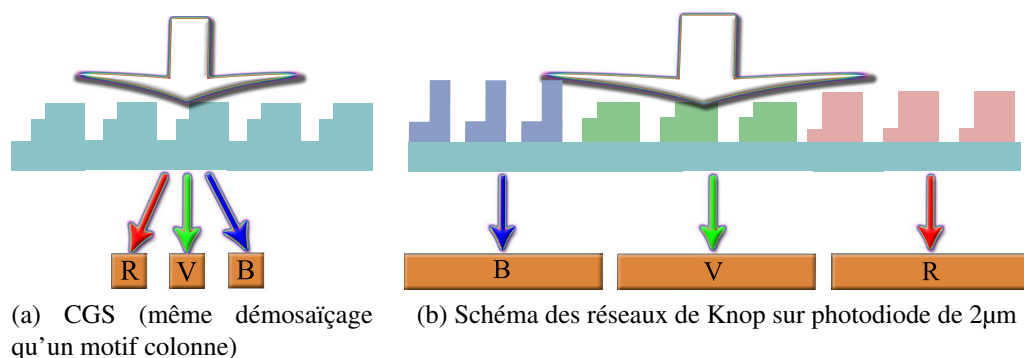


Figure 23: Schéma de l'utilisation potentielle des réseaux diélectriques mono-dimensionnels pour du filtrage colorimétrique

résolution des équations de Maxwell régissant le comportement des champs électriques et magnétiques, que les réseaux mono-dimensionnels diélectriques à profils *en escalier* pouvaient servir de filtres couleur R, V ou B pour une direction de polarisation précise [42, 43]. Les périodes utilisées pour ces réseaux, différentes selon R, V ou B, sont supérieures de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde incidente, donc du tiers de la section du pixel ($2\mu\text{m}$). Pour constituer un motif colonne sur une matrice CMOS (il s'agit encore une fois de réseaux mono-dimensionnels), il conviendrait donc de "modifier la périodicité" du motif tous les trois motifs (cf. Figure 23b) ce qui en changerait la réponse spectrale en transmission. Enfin, la profondeur des sillons du réseau vaut environ un micron dans le cas du réseau sur substrat de verre calculé par Knop, ce qui est supérieur à l'épaisseur des filtres actuellement utilisés. Si la mise en œuvre de ces réseaux au-dessus d'un pixel de $2\mu\text{m}$ paraît difficile, cet exemple montre la possibilité de réaliser des filtres colorimétriques en utilisant des réseaux de pas proche de la longueur d'onde et la nécessité, pour les qualifier, d'y résoudre les équations de Maxwell.

3.2.2 Réseaux sub-longueur d'onde

Dans les domaines fréquentiels de plus grande longueur d'onde, le secteur des télécommunications profite massivement des avancées faites dans le filtrage diffractif, permettant d'obtenir des composants plus intégrables et moins coûteux à fabriquer. La longueur d'onde de travail se situe autour de $1.5\mu\text{m}$ et à cette longueur d'onde, le silicium est transparent tout en conservant une permittivité à forte partie réelle. On peut donc concevoir des réseaux avec une forte modulation d'indice ayant des effets sur une large plage spectrale. Mateus *et al.* ont notamment conçu un miroir large bande $1.3\text{--}1.8\mu\text{m}$ [44] à partir d'un réseau de silicium. Cette réalisation pourrait ouvrir des perspectives pour la réalisation du filtre infrarouge. Cependant la difficulté est que la plupart des matériaux disponibles, notamment en technologie CMOS, ont, dans le visible, des permittivités à forte partie réelle mais présentent aussi de fortes pertes (métaux, silicium ...). Déplacer l'effet large bande d'un tel miroir au proche IR est possible, mais le réseau en résultant serait très absorbant dans le visible et couperait donc aussi le signal correspondant à l'image.

Dans un domaine fréquentiel proche (bande $1.2\text{--}1.4\mu\text{m}$), des avancées prometteuses en termes de rendement ont été réalisées grâce aux surfaces diffractives anti-

réflectives [45].

Dans le domaine optique, la conception de filtres diffractifs, en transmission dans l'ordre 0, passe-bande ou passe-bas, assez large-bande et avec un pic de transmission proche de 1 présente des obstacles conséquents en termes de matériaux disponibles et de moyens technologiques pour les structurer précisément à l'échelle nanométrique. Les technologies les plus avancées, dont la technologie CMOS, autorisent cependant la conception de telles structures diffractives sub-longueur d'onde dans le visible. Celles-ci permettent, à ce titre, une transmission uniquement dans l'ordre spéculaire T_0 (ou $T_{0,0}$ si le réseau est bi-dimensionnel). Plusieurs pistes ont été explorées numériquement, grâce à des codes de calcul électromagnétiques, et réalisées effectivement. On présente, dans les deux paragraphes suivants, ces premières réalisations, indépendantes du contexte des imageurs CMOS, et pour l'ensemble postérieures à 2000, en distinguant les matériaux les constituant, diélectriques ou métalliques.

3.2.2.1 Matériaux diélectriques ou semi-conducteurs

Dans la droite lignée des ailes de cigale, il est possible de réaliser des surfaces anti-réfléctives, sur tout le domaine du visible, au moyen de plots de silice (Figure 24a). Les auteurs de [46] sont parvenus à maintenir $R_{0,0}$ inférieur à 1% du flux incident sur la plage spectrale 400–800 nm, tout en veillant à ce que la couleur réfléchie reste blanche pour conserver le caractère transparent de l'anti-reflet, et ceci dans les deux cas de polarisations TE et TM.

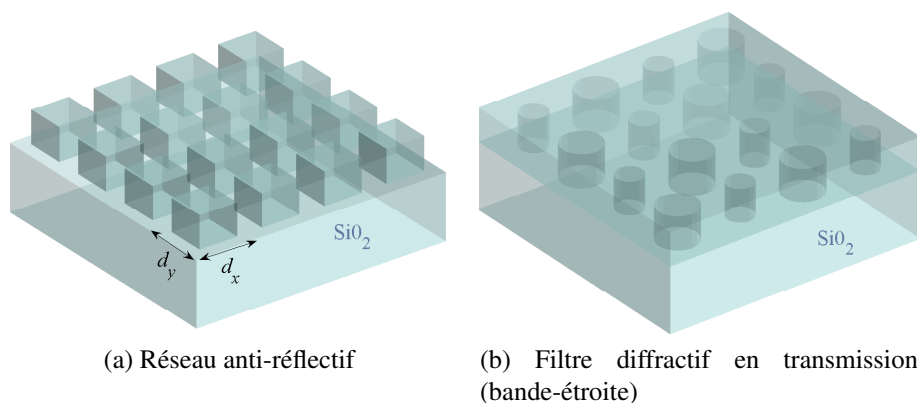


Figure 24: Réseaux sub-longueur d'onde

Les réseaux de diffraction vus comme des guides d'ondes périodiques présentent des pics étroits dans leur spectre réfléchi ou transmis, grâce à l'excitation d'un mode propre de la structure. Cette propriété peut servir à l'élaboration de filtres à bande étroite. Ils requièrent beaucoup moins de couches qu'un multi-couche à bande étroite. Cependant, les résonances sont très sensibles à l'angle et à la polarisation incidente. Fehrembach *et al.* sont parvenus à contourner cet obstacle modifiant les motifs (voir Figure 24b) de telle sorte qu'il soit possible d'exciter plusieurs modes propres en même temps. Si la bande transmise ou réfléchie par ces filtres est, dans ce cas, bien trop étroite pour des applications colorimétriques, cet exemple montre la possibilité de réaliser des filtres passe-bandes indépendants de la polarisation. Magnusson *et al.*, en utilisant ce type de résonances (dites en anglais *Guided-Mode Resonances*, GMR), ont conçu des réseaux accordables au moyen de systèmes micro-mécaniques (MEMS) modifiant les caractéristiques opto-géométriques de la structure [47], et laissant ainsi entrevoir de possibles applications au domaine des écrans numériques couleur.

Des réseaux mono-dimensionnels de silicium sur substrat de quartz (Figure 25a), utilisant ces résonances en transmission, ont été fabriqués par Kanamori *et al.* [48] (voir aussi [49]) et sont adaptés au filtrage colorimétrique RVB, comme le montrent les clichés de la Figure 25b. Les paramètres géométriques utilisés (pour le filtre bleu,

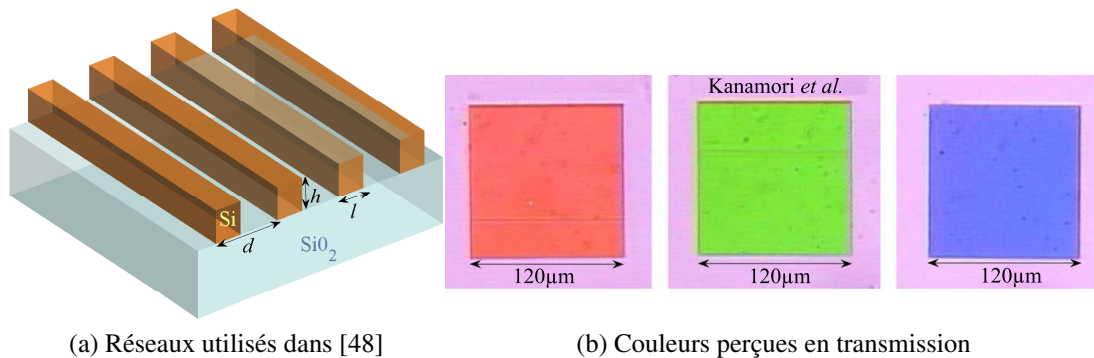


Figure 25: Réseaux sub-longueur d'onde

$d = 440$ nm, $l = 177$ nm et $h = 100$ nm, pour le filtre vert, $d = 350$ nm, $l = 231$ nm et $h = 100$ nm et pour le filtre rouge, $d = 400$ nm, $l = 279$ nm et $h = 100$ nm) se trouvent, de plus, compatibles avec la technologie CMOS. Les profils spectraux (voir [48]) et les maxima atteints en transmission (73.4%, 63.7% et 59.4% de l'énergie incidente,

respectivement pour R, V et B) en font des candidats crédibles pour le filtrage spectral colorimétrique.

Pour pouvoir les adapter au dessus de pixels CMOS dans un arrangement de Bayer, plusieurs aspects restent à étudier. D'abord, le profil spectral passe-bande est obtenu pour un cas de polarisation seulement (TM pour les filtres R et V, TE pour le filtre B). Il faut donc concevoir leurs équivalents bi-dimensionnels. De plus, leur acceptance angulaire doit être d'au moins 30° . Enfin, pour obtenir un arrangement de Bayer, les profils spectraux en transmission doivent rester identiques pour un très faible nombre de périodes ($2.2/0.44 = 5$ périodes par pixel pour le bleu).

Enfin, ajoutons que des réseaux de silice bi-dimensionnels ont été récemment permis de réaliser des micro-lentilles de Fresnel [50] adaptées à un pixel CMOS.

3.2.2.2 Matériaux métalliques

Dans la directe lignée des FSS, les grilles métalliques, constituées d'ouvertures sub-longueur d'onde dans des dépôts métalliques de quelques centaines de nanomètres, connaissent un fort engouement depuis 1998 [51, 52, 53, 54, 55, 31, 56]. Ebbesen *et al.* [52] ont expérimentalement mis en évidence la forte transmission de structures métalliques périodiquement perforées, comme schématisé en Figure 26a. Ces transmissions, alors qualifiées "d'extraordinaires", compte tenu de leur niveau de transmission élevé à travers une couche métallique, sont dues aux interactions entre les ondes évanescentes, appelées plasmons de surface, à la surface du métal.

Considérons, par exemple, un film d'argent de $h = 300$ nm d'épaisseur perforé d'ouvertures circulaires. Barnes *et al.* ont mis en évidence [53] qu'en choisissant $d = 300$ nm, 450 nm et 550 nm et $a = 155$ nm, 180 nm et 225 nm, il était possible de filtrer B, V et R respectivement (Figure 26b). Toutefois, les maxima de transmission restent à déterminer, de même que l'acceptance angulaire et l'influence de la périodicité. Enfin, on notera ici l'incompatibilité de l'argent avec la technologie CMOS.

Une expérience similaire a été menée en 2007 sur des films d'aluminium [54], métal utilisé dans le procédé de fabrication des imageurs actuels.

Notons enfin qu'une structure alternative offrant une transmission encore plus importante (jusqu'à 90%) a été proposée. Elle repose sur l'idée suivante : en obturant partiellement les trous avec un cylindre coaxial aux ouvertures, on permet l'apparition d'un mode guidé au travers des ouvertures [55, 31]. C'est ce mode guidé qui explique

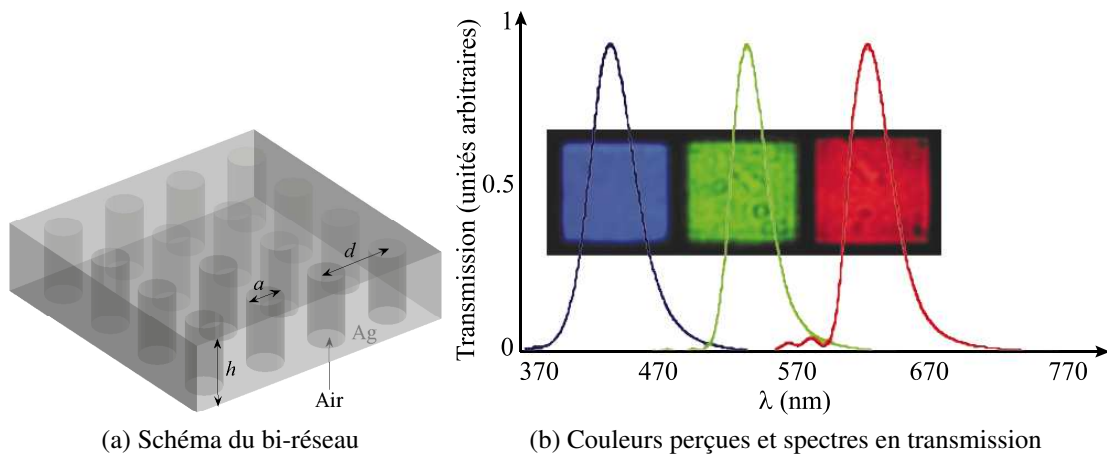


Figure 26: Réseau de nano-trous décrit dans [53]

la très forte transmission prévue par les simulations numériques. Ces structures ont été récemment réalisées (film d'argent sur verre, $h = 100$ nm, $a_1 = 100$ nm, $a_2 = 200$ nm et $d = 350$ nm, voir Figure 27 et [56]) et il est possible d'atteindre 90% de transmission pour $\lambda \approx 700$ nm.

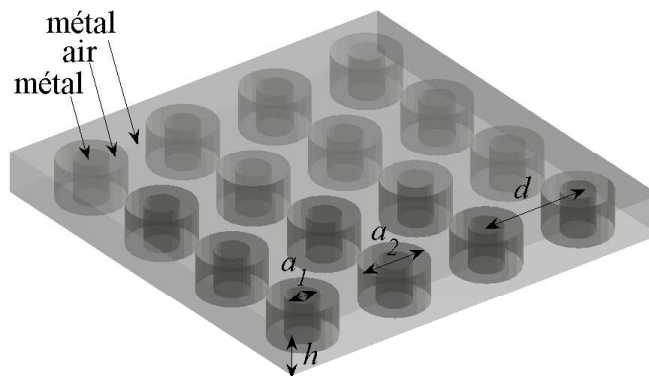


Figure 27: Réseaux d'ouvertures annulaires [56]

Ces résultats, indépendants du contexte des imageurs CMOS, sont à corrélérer avec ceux de Catrysse *et al.* à qui on doit l'idée, en 2003, de filtrer les couleurs en utilisant la diffraction par des réseaux sub-longueur d'onde [57, 58].

Adapter ces bi-réseaux métalliques sub-longueur d'onde aux pixels CMOS, comme schématisé sur les Figures 28b et 28c, est donc une alternative crédible au filtrage

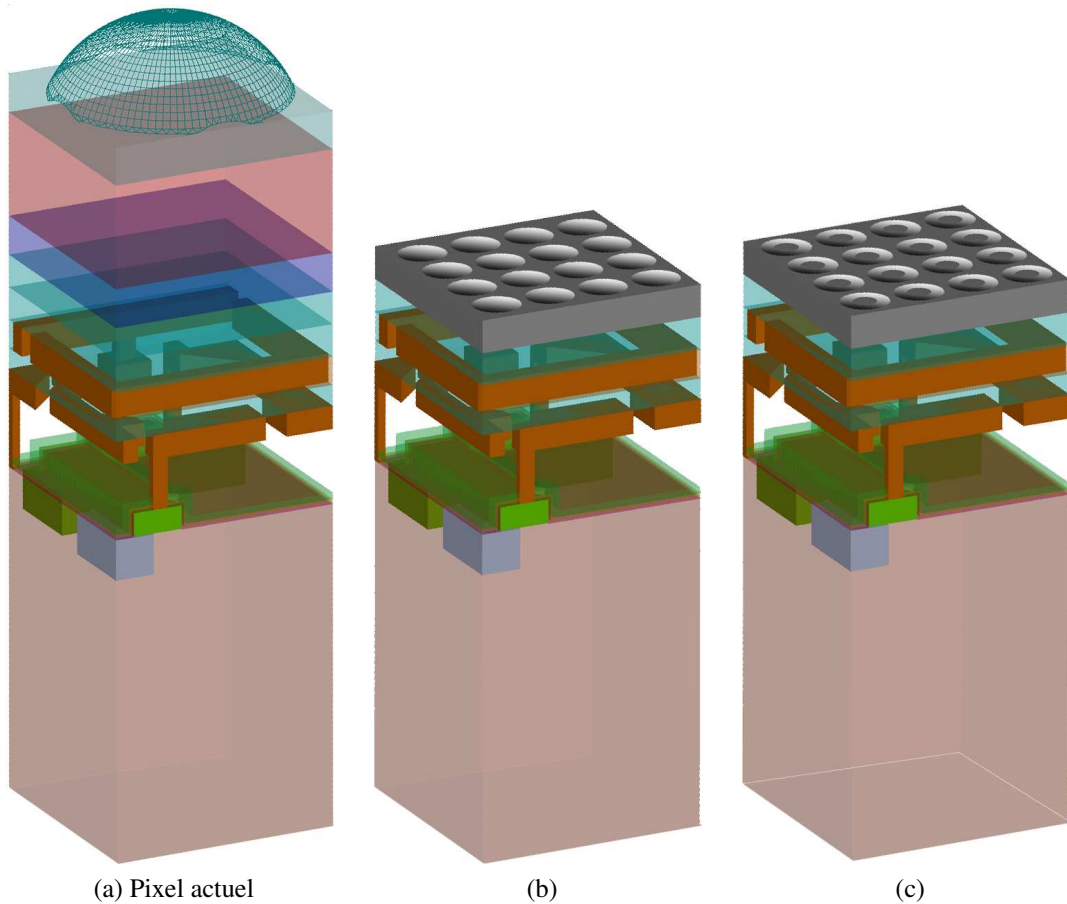


Figure 28: Réseaux sub-longueur d'onde

colorimétrique actuel. Ces figures permettent de juger de la complexité géométrique des structures que nous proposons d'étudier. Pour cela, une méthode très générale est nécessaire. Nous avons donc développé une nouvelle formulation de la FEM permettant de modéliser la diffraction d'une onde plane par de telles structures.

Cette méthode a d'abord été validée numériquement en deux dimensions (cas scalaire, objet du chapitre 2). Nous proposons, dans le chapitre 3, de vérifier la capacité du modèle à rendre compte des résultats expérimentaux, en utilisant des structures de test diffractives, présentant une direction d'invariance et fabriquées en technologie CMOS.

Dans le quatrième chapitre, nous généralisons les développements théoriques du chapitre 2 au cas vectoriel de la diffraction d'une onde plane par un réseau bi-dimensionnel. Ces modèles permettent d'étudier les structures schématisées en Figure 28.

Enfin, dans le chapitre 5, nous étudions, dans le visible, les spectres transmis par différents bi-réseaux métalliques choisis.

Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons présenté les éléments composant un capteur CMOS classique et la méthode de restitution de la couleur présentement utilisée. Les caractéristiques et limitations du filtrage spectral colorimétrique actuel de la lumière (RVB en motif de Bayer) ont été mises en valeur. Nous avons ensuite balayé les différentes solutions alternatives de filtrage spectral. Il nous a paru intéressant de mentionner les autres espaces couleur ou arrangements de filtres possibles pour les imageurs. En effet, les profils spectraux en transmission des résines RVB, actuellement disposées en motif de Bayer, ne représentent pas une "figure imposée". Il était donc important de connaître, au préalable, toutes les possibilités de filtrage existantes et adaptées aux capteurs numériques, de manière à ne négliger aucune piste. Dans le cadre de notre recherche prospective de filtres diffractifs, nous avons réalisé une étude bibliographique des solutions potentielles déjà étudiées, bien au-delà du domaine des imageurs CMOS.

Chapitre 2

Formulation scalaire de la FEM adaptée à l'étude de réseaux mono-dimensionnels quelconques

La modélisation du comportement d'un pixel de capteur CMOS depuis la propagation de la lumière dans l'empilement métallo-diélectrique que constitue le pixel jusqu'au photo-courant, réponse générée dans le silicium, fait appel à de multiples phénomènes physiques complexes : propagation électromagnétique dans des structures bi-périodiques à pertes, absorption optique et génération de paires électron-trou dans le silicium, diffusion des porteurs de charge et collecte dans une jonction p/n. Pour appréhender la difficulté de ce problème à trois dimensions et à inconnues vectorielles, l'étude d'un cas scalaire à deux dimensions est une étape indispensable. Nous avons donc choisi d'aborder en premier lieu le problème des réseaux mono-dimensionnels. Une nouvelle formulation de la FEM a été développée et validée numériquement en la comparant avec des cas classiques de la littérature. Enfin, des structures de test dédiées, à géométrie bi-dimensionnelle, ont été fabriquées à STMicroelectronics Rousset (en collaboration avec le site de Crolles) de manière à éprouver la capacité du modèle théorique à rendre compte des résultats expérimentaux.

La FEM présente l'avantage d'être une méthode très générale qui peut s'adapter à la résolution de problèmes physiques variés faisant intervenir des équations aux dérivées partielles. Une description plus précise en est faite en partie 1.6 de ce chapitre. Elle est largement utilisée dans des domaines tels que la mécanique (pour le

calcul de contraintes par exemple) ou la mécanique des fluides (écoulements). Cependant sa mise en œuvre pour la modélisation de phénomènes électromagnétiques dans le domaine optique restait rare. Dans cette partie, il sera mis en exergue qu'il s'agit d'une méthode précise et rigoureuse grâce à la nouvelle formulation qui en est faite.

Arrêtons-nous un instant sur le choix de la méthode de modélisation retenue. Il existe en effet plus d'une douzaine de méthodes reconnues et dédiées au calcul bi-dimensionnel du champ électromagnétique diffracté par un réseau mono-dimensionnel. Certaines d'entre elles peuvent être appliquées au calcul vectoriel tri-dimensionnel du champ diffracté par un réseau bi-dimensionnel, les autres ne seront pas abordées ici puisque la géométrie du pixel à caractériser ne présente pas d'axe d'invariance. On peut citer notamment la méthode des ondes couplées (*Rigorous Coupled Wave Method* en anglais, RCWA [59, 60]) aussi connue sous le nom de méthode modale de Fourier (*Fourier Modal Method* en anglais, FMM [61]), la méthode de Chandezon (ou méthode C, [62, 63]), la méthode différentielle [64], la méthode intégrale [65], la méthode FDTD [66, 67], la méthode FEM [68, 69, 70], la méthode des sources fictives (*Method of Fictitious Sources* en anglais, MFS [71]) . . .

La RCWA (ou FMM), la méthode différentielle (proche de la RCWA) et la méthode C sont des méthodes couramment employées pour la caractérisation de réseaux mono-dimensionnels. Le problème consistant à résoudre les équations de Maxwell (introduites en Éq. (2.3)) en régime harmonique est réduit à un problème aux valeurs propres dans l'espace de Fourier discret. L'opérateur matriciel est établi en deux étapes. Le champ électromagnétique quasi-périodique est décomposé en série de Rayleigh et les coefficients périodiques des équations de Maxwell sont décomposés en série de Fourier. Dans le cas de la FMM et de la méthode différentielle, on choisit comme coefficients périodiques des équations de Maxwell la fonction permittivité, tandis que dans celui de la méthode C, on choisit la dérivée de la fonction définie par le profil géométrique du réseau. Dès lors que ces fonctions sont discontinues, ces méthodes convergent plus difficilement et plus lentement. Des problèmes de continuité surgissent en effet dans le cas TM avec un fort contraste de permittivité dans le cas de la FMM et avec des motifs diffractifs présentant des bords droits ou non descriptibles par une fonction dans le cas de la méthode C. Des méthodes [72, 73] existent pour contourner ces problèmes de discontinuité mais nécessitent des étapes de programmation supplémentaires.

La FDTD repose sur la propagation d'une impulsion le long d'une grille spatiale. Le champ électrique est calculé à un instant donné, et le champ magnétique à l'instant suivant grâce à l'utilisation d'une grille temporelle et à partir des équations de Maxwell en régime temporel. Cette méthode est largement utilisée, notamment à STMicroelectronics pour la résolution des équations de Maxwell au sein du pixel d'imageur CMOS [74]. Cependant, il est apparu que pour la recherche de phénomènes résonnants comme ceux que nous cherchons à mettre en œuvre pour concevoir des filtres passe-bandes diffractifs, elle nécessite des maillages spatial et temporel très raffinés alourdissant sa résolution. Il s'agit de plus d'une méthode temporelle. Son emploi pour la résolution de problèmes purement harmoniques s'avère donc quelque peu contre-nature.

La résolution du problème de diffraction d'une onde plane par un réseau mono-dimensionnel par la FEM impose de résoudre des problèmes d'infinis. En effet, comme on le verra, cette méthode repose sur le maillage d'une cellule de dimensions impérativement finies alors que le problème posé présente des dimensions infinies selon les trois directions Ox , Oy et Oz (Figure 29a) :

- Selon Oz : C'est l'axe d'invariance du système. Si ce point est une hypothèse simplificatrice d'un point de vue numérique, il sera plus contraignant lors de la conception de structures de test pour valider expérimentalement la méthode.
- Selon Ox : un réseau mono-dimensionnel présente par essence un nombre infini de périodes. L'onde plane source étant elle-même pseudo-périodique, on verra en partie 1.6 de ce chapitre qu'il est possible de borner la cellule de calcul en ne considérant qu'une seule période du réseau.
- Selon Oy : le substrat et le superstrat sont par nature des domaines non bornés. Par une transformation géométrique bien choisie, la partie 1.5 de ce chapitre montre comment ramener ces infinis à distance finie grâce à l'utilisation de couches (en magenta sur la Figure 29b) parfaitement adaptées (*Perfectly Matched Layer* en anglais, PML) et donc de borner ces deux régions selon Oy .
- Selon Oy : la difficulté la plus complexe à contourner réside dans le fait que, par définition, les sources de l'onde plane incidente sont à l'infini. La partie 1.3 montre comment "rapprocher" rigoureusement ces sources à distance finie en se ramenant à un problème radiatif (en jaune sur la Figure 29b).

Enfin, ces principes de *levée des infinis* resteront applicables lorsqu'on considérera la modélisation en trois dimensions d'un réseau bi-dimensionnel.

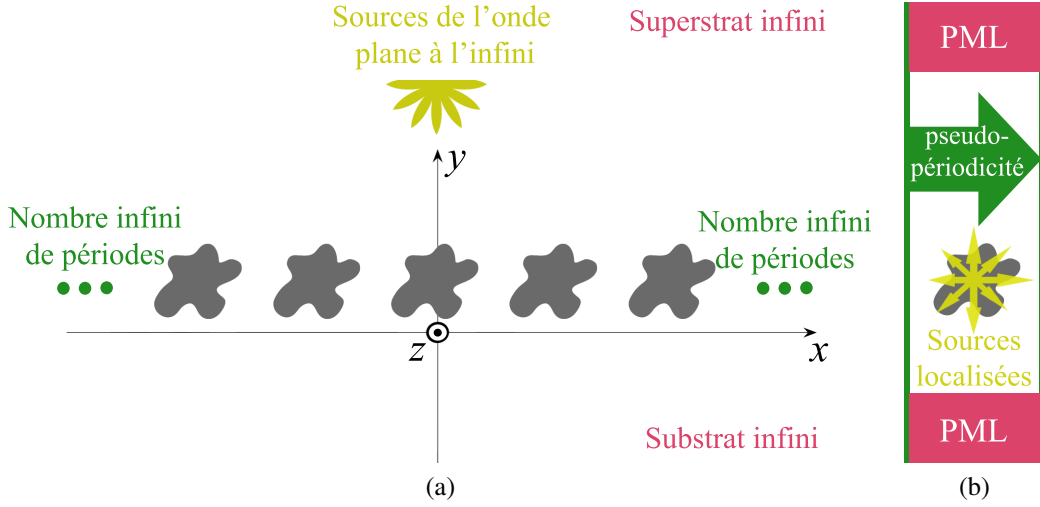


Figure 29: Levée des problèmes d'infinis inhérents à la problématique de la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-dimensionnel

1 Développement théorique de la méthode scalaire

1.1 Description du problème et notations

On note \mathbf{x} , \mathbf{y} et \mathbf{z} les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonal $Oxyz$. Seul le régime harmonique sera ici abordé et les champs électriques et magnétiques seront par conséquent représentés par des vecteurs complexes notés \mathbf{E} et \mathbf{H} avec une dépendance temporelle choisie en $\exp(-i\omega t)$. On suppose dans cette partie que les champs de tenseurs (applications associant à chaque point d'un espace géométrique des tenseurs différents) de permittivité relative $\underline{\underline{\epsilon}}$ et de perméabilité relative $\underline{\underline{\mu}}$ peuvent s'écrire comme il suit :

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \bar{\epsilon}_a & 0 \\ \epsilon_a & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\mu}} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \bar{\mu}_a & 0 \\ \mu_a & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

où $\epsilon_{xx}, \epsilon_a, \dots, \mu_{zz}$ sont des fonctions à valeurs éventuellement complexes des deux variables d'espace x et y et où $\bar{\epsilon}_a$ (resp. $\bar{\mu}_a$) représente le complexe conjugué ϵ_a (resp. μ_a). Ces matériaux sont baptisés z -anisotropes dans la suite, en ce sens que, dans les cas TE et TM, l'anisotropie est effective uniquement selon \mathbf{x} et \mathbf{y} . Il est important de no-

ter d'une part que ce formalisme de champs de tenseurs autorise l'étude de matériaux à pertes (les matériaux sans pertes étant associés à des tenseurs dont les termes diagonaux sont réels, alors représentés par des matrices hermitiennes). D'autre part, le problème est certes invariant selon la direction Oz , mais le champ de tenseurs peut varier continûment (on parlera alors de réseau à gradient d'indice) ou même de façon discontinue (réseau à saut d'indice) selon x et (ou) selon y . On définit enfin $k_0 := \omega/c$.

La famille de structures périodiques (de période notée d) à l'étude peut être décomposée en plusieurs sous-domaines :

- *Le superstrat* ($y > y_0$) qui est supposé homogène, isotrope et sans perte, caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε^+ et sa perméabilité magnétique relative μ^+ . On note $k^+ := k_0 \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+}$ le module du vecteur d'onde.
- *L'empilement multi-couches* ($y_0 < y < y_N$) est composé d'un empilement de N couches supposées homogènes et isotropes, caractérisées par leur permittivité diélectrique relative ε_n , leur perméabilité magnétique relative μ_n et leur épaisseur e_n . On note $k_n := k_0 \sqrt{\varepsilon_n \mu_n}$ pour n entier de 1 à N .
- *La région des sillons* ($y_{g-1} < y < y_g$) qui est enterrée dans la $g^{\text{ième}}$ couche (ε_g, μ_g) du domaine décrit ci-dessus. Elle peut être anisotrope et hétérogène, et est donc décrite par deux champs de tenseurs $\underline{\underline{\varepsilon}}_{g'}(x, y)$ et $\underline{\underline{\mu}}_{g'}(x, y)$. Notons aussi que ces champs peuvent être constants par morceau. La périodicité des sillons est notée d .
- *Le substrat* ($y < y_N$) qui est supposé homogène et isotrope, caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε^- et sa perméabilité magnétique relative μ^- . On note $k^- := k_0 \sqrt{\varepsilon^- \mu^-}$.

Les permittivités relatives présentées ci-dessus peuvent être complexes, autorisant l'étude de couches à pertes. Le problème est considéré invariant selon l'axe des z . Cette structure est illuminée par une onde plane de vecteur d'onde noté $\mathbf{k}^+ = \alpha \mathbf{x} + \beta^+ \mathbf{y} = k^+ (\sin \theta_0 \mathbf{x} - \cos \theta_0 \mathbf{y})$, dont le champ électrique (Transverse Électrique, TE, ou polarisation- s) (resp. champ magnétique (Transverse Magnétique, TM, ou polarisation- p)) est polarisé linéairement selon l'axe des z :

$$\mathbf{E}_e^0 = \mathbf{A}_e^0 \exp(i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}) \mathbf{z} \quad (\text{resp. } \mathbf{H}_m^0 = \mathbf{A}_m^0 \exp(i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}) \mathbf{z}), \quad (2.2)$$

où \mathbf{A}_e^0 (resp. \mathbf{A}_m^0) est un nombre complexe quelconque. Le champ magnétique (resp. électrique) associé à \mathbf{E}_e^0 (resp. \mathbf{H}_m^0) est noté \mathbf{H}_e^0 (resp. \mathbf{E}_m^0). Enfin, le champ électroma-

gnétique associé au champ incident est noté $(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)$ et vaut $(\mathbf{E}_e^0, \mathbf{H}_e^0)$ (resp. $(\mathbf{E}_m^0, \mathbf{H}_m^0)$). Le problème de diffraction à résoudre ici revient à trouver les solutions des équations

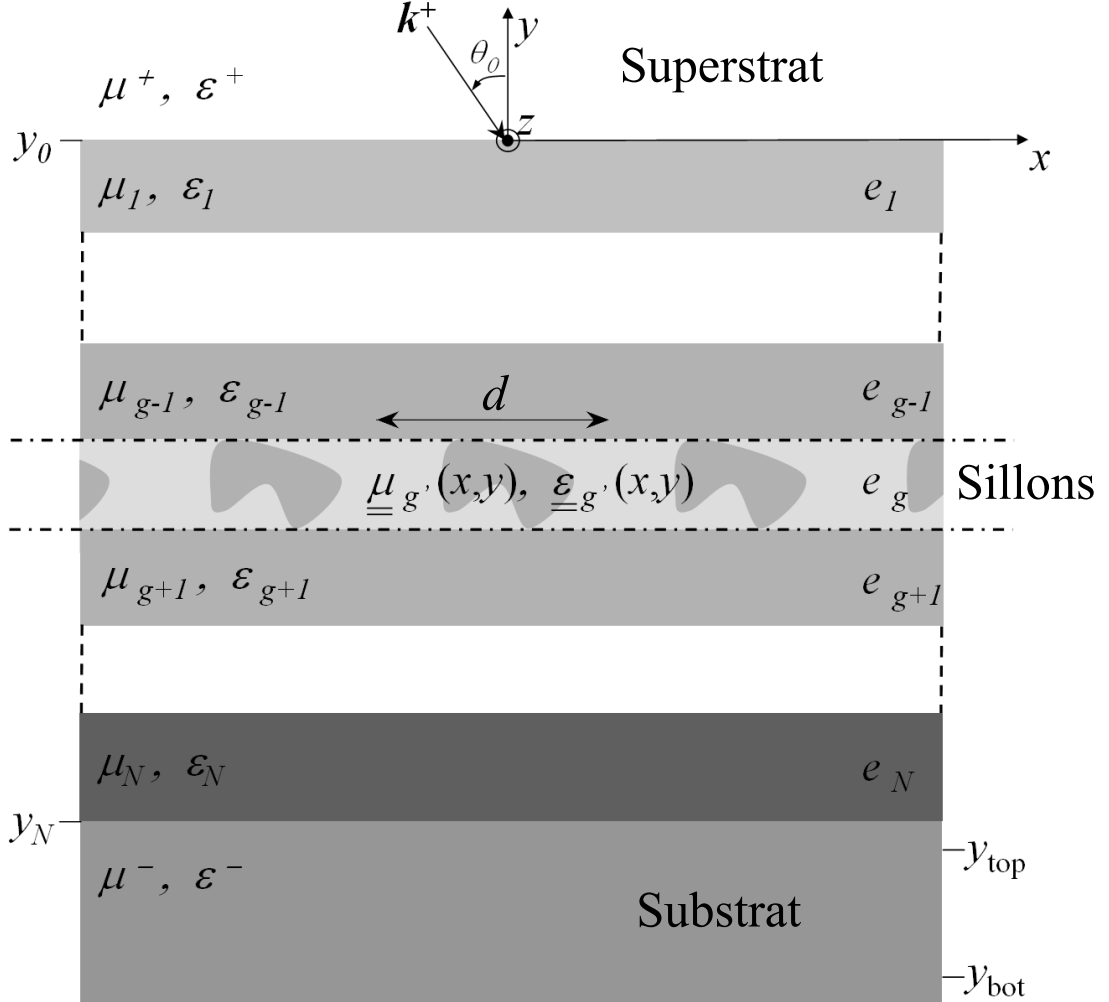


Figure 30: Schéma et notations de la structure étudiée.

de Maxwell en régime harmonique, c'est-à-dire l'unique couple (\mathbf{E}, \mathbf{H}) solution de :

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{E} = i \omega \mu_0 \underline{\underline{\mu}} \mathbf{H} & (2.3a) \\ \text{rot } \mathbf{H} = -i \omega \epsilon_0 \underline{\underline{\epsilon}} \mathbf{E} & (2.3b) \end{cases}$$

tel que le champ diffracté satisfait une Condition d'Onde Sortante (COS [75]) et où \mathbf{E} et \mathbf{H} sont des fonctions quasi-périodiques selon x . On rappelle qu'une fonction est dite quasi-périodique s'il existe $u_{\#}$ tel que $u(x, y) = u_{\#}(x, y)e^{i\alpha x}$ où $u_{\#}(x, y) = u_{\#}(x + d, y)$ est une fonction d -périodique.

1.2 Découplage des champs et z-anisotropie

On suppose que $\underline{\underline{\delta}}(x, y)$ est un champ de tenseur z-anisotrope ($\delta_{xz} = \delta_{yz} = \delta_{zx} = \delta_{zy} = 0$). De plus, on extrait de $\underline{\underline{\delta}}$ la matrice 2×2 (notée $\underline{\underline{\tilde{\delta}}}$) suivante :

$$\underline{\underline{\tilde{\delta}}} = \begin{pmatrix} \delta_{xx} & \bar{\delta}_a \\ \bar{\delta}_a & \delta_{yy} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Pour des matériaux z-anisotropes, dans le cas non conique, le problème de diffraction peut être décomposé en deux cas fondamentaux (cas TE et cas TM). Cette propriété résulte de l'égalité suivante, qui peut être démontrée en développant ses membres gauche et droite :

$$-\text{rot} \left(\underline{\underline{\delta}}^{-1} \text{rot}(u \mathbf{z}) \right) = \text{div} \left(\underline{\underline{\tilde{\delta}}}^T / \det(\underline{\underline{\tilde{\delta}}}) \nabla u \right) \mathbf{z}, \quad (2.5)$$

lorsque u est une fonction qui ne dépend que des variables x et y . D'après cette égalité, le problème de diffraction dans le cas non conique revient donc à rechercher un champ électrique (resp. magnétique) polarisé selon l'axe des z ; $\mathbf{E} = e(x, y) \mathbf{z}$ (resp. $\mathbf{H} = h(x, y) \mathbf{z}$). Ces fonctions e et h sont alors solutions d'équations différentielles semblables :

$$\mathcal{L}_{\underline{\underline{\xi}}, \chi}(u) := \text{div} \left(\underline{\underline{\xi}} \nabla u \right) + k_0^2 \chi u = 0 \quad (2.6)$$

avec

$$u = e, \quad \underline{\underline{\xi}} = \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^T / \det(\underline{\underline{\tilde{\mu}}}), \quad \chi = \epsilon_{zz} \quad (2.7)$$

dans le cas TE,

$$u = h, \quad \underline{\underline{\xi}} = \underline{\underline{\tilde{\epsilon}}}^T / \det(\underline{\underline{\tilde{\epsilon}}}), \quad \chi = \mu_{zz} \quad (2.8)$$

dans le cas TM.

1.3 Passage du problème diffractif à un problème radiatif à sources localisées

Sous sa forme brute, le problème de diffraction associé à l'Éq. (2.6) est mal adapté à la Méthode des Éléments Finis. Pour contourner cette difficulté, nous proposons de décomposer la fonction u recherchée en une somme de deux fonctions u_1 et u_2^d , le premier terme étant connu comme une forme explicite, et le second étant solution d'un problème de radiation dont les sources sont confinées dans l'élément diffractif.

On suppose qu'en dehors de la région des sillons, le champ de tenseur $\underline{\underline{\xi}}$ et la fonction χ sont constants et valent respectivement $\underline{\underline{\xi}}^-$ et χ^- dans le substrat ($y < y_N$), $\underline{\underline{\xi}}^+$ et χ^+ dans le superstrat ($y > y_0$), et $\underline{\underline{\xi}}^n$ et χ^n la couche de l'empilement indiquée n ($y_n < y < y_{n-1}$). Ayant considéré le superstrat, chaque couche de l'empilement et le substrat, indicés respectivement $\{+, n, -\}$, comme constitués de matériaux homogènes et isotropes, leurs propriétés sont définies uniquement par leur permittivité relative $\varepsilon^{\{+, n, -\}}$ et leur perméabilité relative $\mu^{\{+, n, -\}}$. Il s'ensuit donc :

$$\underline{\underline{\xi}}^{\{+, n, -\}} = \frac{1}{\varepsilon^{\{+, n, -\}}} \text{Id}_2 \quad \text{et} \quad \chi^{\{+, n, -\}} = \mu^{\{+, n, -\}} \quad \text{dans le cas TE} \quad (2.9)$$

ou

$$\underline{\underline{\xi}}^{\{+, n, -\}} = \frac{1}{\mu^{\{+, n, -\}}} \text{Id}_2 \quad \text{et} \quad \chi^{\{+, n, -\}} = \varepsilon^{\{+, n, -\}} \quad \text{dans le cas TM,} \quad (2.10)$$

où Id_2 est la matrice identité 2×2 .

Avec les conventions prises en 1.1 de ce chapitre, $\underline{\underline{\xi}}$ et χ peuvent alors être explicitement écrites sous forme de fonctions définies par morceaux :

$$\underline{\underline{\xi}}(x, y) := \begin{cases} \underline{\underline{\xi}}^+ & \text{pour } y > 0 \\ \underline{\underline{\xi}}^n & \text{pour } y_{n-1} > y > y_n \quad \text{avec } 1 \leq n < g \\ \underline{\underline{\xi}}^{g'}(x, y) & \text{pour } y_{g-1} > y > y_g \\ \underline{\underline{\xi}}^m & \text{pour } y_{m-1} > y > y_m \quad \text{avec } g < m \leq N \\ \underline{\underline{\xi}}^- & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\chi(x, y) := \begin{cases} \chi^+ & \text{pour } y > 0 \\ \chi^n & \text{pour } y_{n-1} > y > y_n \quad \text{avec } 1 \leq n < g \\ \chi^{g'}(x, y) & \text{pour } y_{g-1} > y > y_g \\ \chi^m & \text{pour } y_{m-1} > y > y_m \quad \text{avec } g < m \leq N \\ \chi^- & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.12)$$

avec :

$$y_0 = 0 \quad \text{et} \quad y_n = - \sum_{l=1}^n e_l \quad \text{pour } 1 \leq n \leq N \quad (2.13)$$

Il est à présent utile d'introduire un champ de tenseurs $\underline{\underline{\xi}}_1$ et une fonction χ_1 définis comme des fonctions constantes par morceaux et associés au cas du simple empilement

multi-couches :

$$\underline{\xi}_{\underline{1}}(x, y) := \begin{cases} \xi^+ & \text{pour } y > 0 \\ \xi^n & \text{pour } y_{n-1} > y > y_n \text{ avec } 1 \leq n \leq N \\ \xi^- & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\chi_1(x, y) := \begin{cases} \chi^+ & \text{pour } y > 0 \\ \chi^n & \text{pour } y_{n-1} > y > y_n \text{ avec } 1 \leq n \leq N \\ \chi^- & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.15)$$

On note enfin u_0 la restriction de u^{inc} au superstrat :

$$u_0(x, y) := \begin{cases} u^{\text{inc}} & \text{pour } y > y_0 \\ 0 & \text{pour } y < y_0 \end{cases} \quad (2.16)$$

Nous pouvons alors définir de manière plus concise le problème de diffraction posé. La fonction u recherchée est l'unique solution de :

$$\mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}(u) = 0 \quad \text{tel que } u^d := u - u_0 \text{ satisfait une COS.} \quad (2.17)$$

Pour se ramener à un problème purement radiatif, une fonction intermédiaire est nécessaire. Cette fonction, appelée u_1 est définie comme l'unique solution de :

$$\mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi_1}(u_1) = 0 \quad \text{tel que } u_1^d := u_1 - u_0 \text{ satisfait une C.O.S.} \quad (2.18)$$

Ainsi, la fonction u_1 correspond-elle à un *problème annexe* associée au cas du simple empilement multicouches et peut être mise sous une forme analytique simple (cf. partie 1.4). La fonction u_1 sera donc dorénavant considérée comme connue. Il est maintenant possible d'expliciter la fonction u_2^d dont il a déjà été fait mention en introduction : cette fonction est en fait simplement définie comme la différence entre u et u_1 :

$$u_2^d := u - u_1 = u^d - u_1^d. \quad (2.19)$$

La présence de l'exposant d n'est bien entendu pas fortuite : en tant que différence de deux champs diffractés, la C.O.S. de u_2^d est assurée. Cela a une importance capitale dans notre méthode, qui repose, entre autres, sur l'utilisation de Couches Parfaitement Adaptées (en anglais *Perfectly Matched Layer*, PML) dont le lecteur pourra trouver en

[76] une description adaptée au régime harmonique et à la FEM. Compte tenu de la définition de l'opérateur $\mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}$ l'Éq. (2.17) peut alors s'écrire :

$$\mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}(u_2^d) = -\mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}(u_1), \quad (2.20)$$

où le membre de droite est une fonction scalaire qui peut être interprétée comme un *terme source connu* $-\mathcal{S}_1(x, y)$ dont le support est limité à la région des sillons. Il suffit pour le prouver de considérer l'Éq. (2.18) :

$$\mathcal{S}_1 := \mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}(u_1) = \mathcal{L}_{\underline{\xi}, \chi}(u_1) - \underbrace{\mathcal{L}_{\underline{\xi}_1, \chi_1}(u_1)}_{=0} = \mathcal{L}_{\underline{\xi} - \underline{\xi}_1, \chi - \chi_1}(u_1). \quad (2.21)$$

En se souvenant que les champs de tenseurs $\underline{\xi}$ (Éq. (2.11)) et $\underline{\xi}_1$ (Éq. (2.14)) et les fonctions χ (Éq. (2.12)) et χ_1 (Éq. (2.15)) sont identiques en dehors des sillons, il apparaît que le support de \mathcal{S}_1 est bien localisé dans la région des sillons, et plus précisément borné par l'obstacle diffractif lui-même. Reste donc à expliciter le terme source \mathcal{S}_1 .

1.4 Expression du terme source

Les calculs classiques [77] utilisés en couches minces optiques permettent d'exprimer u_1 sous la forme suivante (pour $1 \leq n \leq N$) :

$$u_1(x, y) = u_0(x, y) + \exp(i\alpha x) \begin{cases} r \exp(-i\beta^+ y) & \text{pour } y > 0 \\ v_n^c + v_n^p & \text{pour } y_n < y < y_{n-1} \\ t \exp(i\beta^- y) & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.22)$$

où

$$\begin{aligned} v_n^c &= u_n^c \exp(-i\beta_n(y - y_n)) \\ \text{et } v_n^p &= u_n^p \exp(i\beta_n(y - y_n)) \end{aligned} \quad (2.23)$$

avec $\beta_n^2 = k_n^2 - \alpha^2$, u_n^c et u_n^p étant deux nombres complexes calculés à partir d'un formalisme matriciel que nous ne présenterons pas ici. Il s'agit en effet d'un cas particulier du cas vectoriel général présenté en annexe A. Les coefficients de réflexion et transmission de r et t de l'empilement peuvent être déduits de ce même formalisme. Enfin, les exposants p et c illustrent la nature *propagative* ou *contra-propagative* des ondes planes définies par v_n^p et v_n^c .

En utilisant la linéarité de l'opérateur \mathcal{L} et l'expression de u_1 dans la région des sillons ($v_g^c + v_g^p$, voir l'Éq. (2.22)), il apparaît que le terme source peut être décomposé en deux contributions :

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_1^c + \mathcal{S}_1^p, \quad (2.24)$$

où

$$\mathcal{S}_1^p = \mathcal{L}_{\underline{\xi} - \underline{\xi}_1, \chi - \chi_1} (v_g^p) \quad (2.25)$$

et

$$\mathcal{S}_1^c = \mathcal{L}_{\underline{\xi} - \underline{\xi}_1, \chi - \chi_1} (v_g^c). \quad (2.26)$$

Ces termes se calculent sous une forme suffisamment explicite pour la formulation faible (détaillé en partie 1.6 de ce chapitre) associée à l'Éq. (2.20) :

$$\mathcal{S}_1^p = u_n^p \left\{ i \operatorname{div} \left[\left(\underline{\xi}^{g'} - \underline{\xi}^g \right) \mathbf{k}^{g,p} \exp(i\mathbf{k}^{g,p} \cdot \mathbf{r}) \right] + k_0^2 \left(\chi^{g'} - \chi^g \right) \exp(i\mathbf{k}^{g,p} \cdot \mathbf{r}) \right\} \quad (2.27)$$

et

$$\mathcal{S}_1^c = u_n^c \left\{ i \operatorname{div} \left[\left(\underline{\xi}^{g'} - \underline{\xi}^g \right) \mathbf{k}^{g,c} \exp(i\mathbf{k}^{g,c} \cdot \mathbf{r}) \right] + k_0^2 \left(\chi^{g'} - \chi^g \right) \exp(i\mathbf{k}^{g,c} \cdot \mathbf{r}) \right\} \quad (2.28)$$

où $\mathbf{k}^{g,p}$ (resp. $\mathbf{k}^{g,c}$) est le vecteur d'onde associé à l'onde propagative (resp. contre-propagative) se propageant dans la couche g décrite par l'Éq. (2.22) et l'Éq. (2.23).

Ce problème radiatif pour lequel les sources sont localisées dans l'élément diffractif et où la propagation se fait du support des sources vers les régions infinies du problème (substrat et superstrat) donne tout son sens à l'utilisation de PML pour borner ces régions par essence semi-infinies selon Oy . Ces PML ont alors pour rôle de capter ces sources sans aucune réflexion, laissant invariant le champ dans la région que nous nommons *zone d'intérêt*, laquelle est enserrée entre les deux zones PML (du haut et du bas, grisées sur la Figure 31a).

1.5 Couches Parfaitement Adaptées (PML)

1.5.1 Généralités : les PML vues comme des transformations géométriques

Une des principales difficultés rencontrée lors de l'emploi de la FEM pour la théorie des réseaux se résume par le fait que les modes propagatifs dans le substrat et le superstrat (ou ordres de diffraction transmis et réfléchis) ne s'atténuent pas dans les cas de

matériaux sans pertes. Les PML ont été introduites par Bérenger [78] pour s'affranchir de ce problème. Cette partie est dédiée au calcul des PML utilisées pour tronquer un substrat et un superstrat isotropes. À partir de maintenant, on désignera par substrat (resp. superstrat) le domaine borné situé juste au-dessus (resp. en-dessous) de la PML du bas (du haut).

La PML peut être vue comme un *changement de coordonnées*, c'est-à-dire une *transformation géométrique*. Cette transformation de l'espace est traduite par des *propriétés matérielles équivalentes* [79, 80, 81, 82] pour la PML. Le changement de coordonnées est choisi complexe de sorte que les ondes planes propagatives deviennent évanescentes.

Ici l'utilisation de conditions de quasi-périodicité rend naturelle l'adoption de PML rectangulaires. Pour ce type de PML, il convient donc d'introduire de nouveaux champs de tenseurs $\underline{\underline{\varepsilon}}_s(x, y)$ et $\underline{\underline{\mu}}_s(x, y)$ définis comme il suit :

$$\underline{\underline{\delta}}_s := J_s^{-1} \underline{\underline{\delta}} J_s^{-T} \det(J_s) \quad \text{pour } \delta = \{\varepsilon, \mu\}, \quad (2.29)$$

où J_s est appelée matrice Jacobienne étirée. Dans cette étude, cette dernière est définie comme diagonale, $J_s = \text{diag}(1, s_y(y), 1)$, où $s_y(y)$ est une fonction à valeurs complexes de y . En se référant à l'Éq. (2.1), $\underline{\underline{\delta}}_s$ s'écrit donc :

$$\underline{\underline{\delta}}_s = \begin{pmatrix} s_y \delta_{xx} & \bar{\delta}_d & 0 \\ \delta_d & s_y^{-1} \delta_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \delta_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

On peut alors introduire un nouveau champ électromagnétique (appelé champ substitué dans la suite) $\mathbf{F}_s = (\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)^T$ solution de l'Éq. (2.3), à ceci près que $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\mu}}$ sont remplacés par $\underline{\underline{\varepsilon}}_s$ et $\underline{\underline{\mu}}_s$. La principale caractéristique de ce nouveau champ réside dans sa remarquable correspondance avec le premier champ \mathbf{F} ; quel que soit le choix de la fonction s_y , à condition qu'elle ait pour valeur 1 pour $Y_*^+ < y < Y_*^-$ (cf. Figure 31a), les deux champs \mathbf{F} et \mathbf{F}_s ont la même valeur dans la région $Y_*^+ < y < Y_*^-$ [76]. De plus, considérant une fonction s_y ($\Im m\{s_y\}$ strictement positive dans la PML), le champ \mathbf{F}_s converge exponentiellement vers zéro (quand y tend vers $\pm\infty$, cf. Figure 31c) contrairement à la solution mathématique \mathbf{F} . On note sur la carte de champ de la Figure 31d, que le *champ rayonné* sur les frontières limites des PML est au moins 10^{-8} plus faible que dans la zone d'intérêt. Il apparaît donc que \mathbf{F}_s est d'énergie finie, ce qui est une

condition nécessaire pour établir la formulation faible. Enfin, on peut associer à ce champ substitué une formulation faible, aspect primordial avec l'utilisation de la FEM.

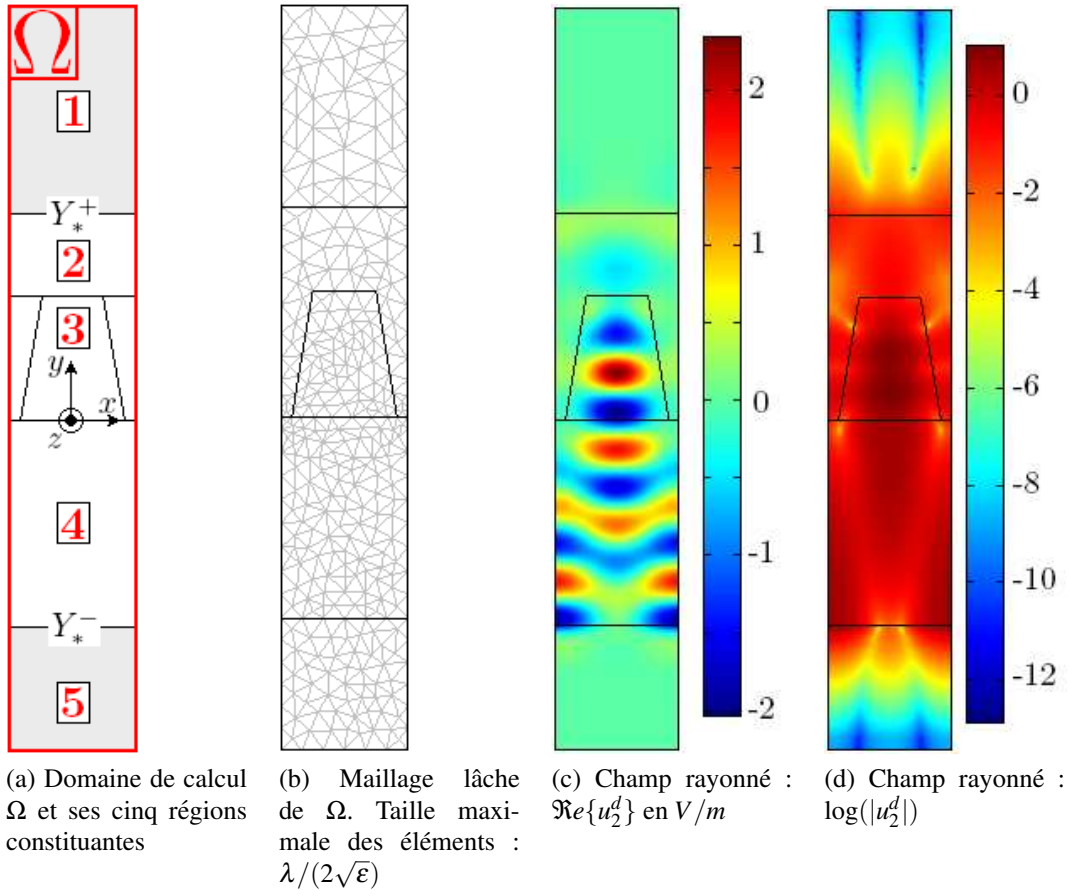


Figure 31: Illustration de l'utilisation des PML dans le cas d'un élément diffractif posé sur un dioptre plan (cas TE, voir l'application numérique complète en 3.2)

1.5.2 Choix des paramètres associés aux PML

Avec des fonctions d'étirement simples, il est possible de donner un critère fiable assurant la décroissance exponentielle du champ F_s dans les PML. Prenons l'exemple

suivant :

$$s_y(y') = \begin{cases} \zeta^+ & y > Y_*^+ \\ \zeta^- & y < Y_*^- \\ 1 & \text{partout ailleurs} \end{cases}$$

où ζ^+ et ζ^- sont des nombres complexes. Dans ce cas, la fonction complexe $y(y_c)$ est donnée par :

$$y(y_c) = \begin{cases} Y_*^+ + \zeta^+(y_c - Y_*^+) & \text{pour } y_c > Y_*^+ \\ y_c & \text{pour } Y_*^- < y_c < Y_*^+ \\ Y_*^- + \zeta^-(y_c - Y_*^-) & \text{pour } y_c < Y_*^- \end{cases}.$$

Considérons à présent une onde plane (un ordre de diffraction) se propageant dans le substrat dans le sens des y décroissants $u_n(x, y) := \exp(i(\alpha x - \beta_{+,n}^- y))$. On peut l'exprimer dans le système de coordonnées étirées dans la PML de la manière suivante :

$$u_n^{\text{sc}}(x_c, y_c) := u_n(x(x_c), y(y_c)) = e^{i\alpha x_c} e^{-i\beta_{+,n}^-(Y_*^- + \zeta^-(y_c - Y_*^-))} \quad (2.31)$$

Le comportement de cette dernière fonction le long de y_c est décrit par la fonction $U^{\text{sc}}(y_c) := e^{-i\beta_{+,n}^- \zeta^- y_c}$. Si $\beta_{+,n}'^- := \Re\{\beta_{+,n}^-\}$, $\beta_{+,n}''^- := \Im\{\beta_{+,n}^-\}$, $\zeta'^- := \Re\{\zeta^-\}$ et $\zeta''^- := \Im\{\zeta^-\}$, l'enveloppe non oscillante de la fonction $U^{\text{sc}}(y_c)$ est donnée par $\exp((\beta_{+,n}'^- \zeta''^- + \beta_{+,n}''^- \zeta'^-) y_c)$. En se souvenant que $\beta_{+,n}'^-$ et/ou $\beta_{+,n}''^-$ sont des réels positifs, U^{sc} décroît exponentiellement vers zéro quand y_c tend vers $-\infty$ (Figure 31d) si ζ^- appartient à $\mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C}, \Re\{z\} > 0, \text{ et } \Im\{z\} > 0\}$. De la même manière, on peut montrer que ζ^+ doit appartenir à \mathbb{C}^+ pour assurer la décroissance du champ dans la PML limitant le superstrat.

1.6 Formulation faible et quasi-périodicité

La formulation faible est classiquement basée sur la construction d'un résidu pondéré de l'Éq. (2.6), qui est multipliée par le complexe conjugué d'une fonction de poids u' et intégrée par partie pour obtenir :

$$\mathcal{R}_{\underline{\xi}, \chi}(u, u') = - \int_{\Omega} \left(\underline{\xi} \nabla u \right) \cdot \nabla \bar{u}' + k_0^2 \chi u \bar{u}' d\Omega + \int_{\partial\Omega} \bar{u}' \left(\underline{\xi} \nabla u \right) \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.32)$$

Soit $L^2(\text{rot}, d, \alpha)$ l'ensemble des fonctions quasi-périodiques de période d de carré intégrable sur Ω (c'est-à-dire appartenant à l'espace de Hilbert noté $L^2(\Omega)$) et dont le

rotationnel appartient aussi à $L^2(\Omega)$. La solution u de la formulation faible peut être définie comme l'élément de l'espace $L^2(\text{rot}, d, \alpha)$ tel que :

$$\mathcal{R}_{\underline{\xi}, \chi}(u, u') = 0 \quad \forall u' \in L^2(\text{rot}, d, \alpha). \quad (2.33)$$

L'existence et l'unicité d'une solution à ce problème est garantie (selon les signes de $\underline{\xi}$ et de χ , point non abordé ici) par le théorème de Lax-Milgram [83].

Le terme de bord introduit par l'intégration par partie est nul à condition de choisir une des trois *conditions de bord* suivantes :

- *imposer u directement sur les frontières concernées de $d\Omega$ (conditions de Dirichlet)* : la fonction de poids peut être choisie nulle sur ces frontières,
- *imposer $(\underline{\xi} \nabla u) \cdot \mathbf{n} = 0$ (conditions de Neumann homogènes)* . u est alors une inconnue à déterminer sur les frontières concernées. Il est commode d'utiliser cette condition en extrémité (appelées Γ_h et Γ_g , en violet sur la Figure 33) de PML de manière à connaître la valeur du champ sur ces frontières. En effet, l'ordre de grandeur de cette valeur, comparé à celui du champ dans la zone d'intérêt, constitue une bonne information sur l'efficacité de la PML (voir Figure 31d).
- *imposer des conditions dites de quasi-périodicité ou de Bloch*, indispensables à la modélisation de réseaux. Appelons Γ_g et Γ_d l'ensemble des frontières parallèles à l'axe des y et délimitant la cellule de calcul à gauche et à droite respectivement (cf. Figure 33). Étant donné que u et u' font partie de $L^2(\text{rot}, d, \alpha)$, le terme de frontière pour $\Gamma_g \cup \Gamma_d$ s'écrit :

$$\int_{\Gamma_g \cup \Gamma_d} \overline{u'} \left(\underline{\xi} \nabla u \right) \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Gamma_g \cup \Gamma_d} \overline{u'}_{\#} e^{-i\alpha x} \left(\underline{\xi} \nabla (u_{\#} e^{+i\alpha x}) \right) \cdot \mathbf{n} dS =$$

$$\int_{\Gamma_g \cup \Gamma_d} \overline{u'}_{\#} \left(\underline{\xi} (\nabla u_{\#} + i\alpha u_{\#} \mathbf{x}) \right) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

puisque l'intégrande $\overline{u'}_{\#} \left(\underline{\xi} (\nabla u_{\#} + i\alpha u_{\#} \mathbf{x}) \right) \cdot \mathbf{n}$ est périodique selon x et que la normale \mathbf{n} présente des directions opposées sur Γ_g et Γ_d . Les contributions de ces deux ensembles de frontières parallèles sont donc de même valeur absolue mais avec des signes opposés. Leur contribution s'annule donc naturellement dans le cadre de la quasi-périodicité. Les conditions de quasi-périodicité sont imposées pratiquement en considérant u comme inconnue sur Γ_g (ce qui s'apparente donc à une condition de Neumann homogène), tandis que la valeur de u en un point

de Γ_g est imposée égale à la valeur du point lui correspondant sur Γ_d , multipliée par le déphasage $e^{i\alpha d}$ [84].

1.7 Maillage et éléments finis

La méthode des éléments finis est basée sur cette formulation faible. La solution recherchée u_2^d dans la cellule Ω est projetée dans une base composée de fonctions $w_i \in L^2(\text{rot}, d, \alpha)$ associées au maillage (triangulaire sur la Figure 32). Ainsi, la fonction $u_2^{d,I}$ définie par :

$$u_2^{d,I}(x, y) = \sum_{i \in I} \vartheta_i w_i(x, y) \quad (2.34)$$

est une approximation de u_2^d où I est un ensemble d'entiers définis à partir du maillage de la cellule Ω . Les ϑ_i sont les scalaires à déterminer tandis que les w_i sont les fonctions de base du maillage qui vérifient :

- À chaque nœud noté M_i est associée une fonction w_i .
- $|w_i| = 1$ au nœud M_i et $w_i = 0$ sur tous les autres nœuds.
- w_i décroît linéairement de M_i aux nœuds voisins comme le suggère la surface colorée de la Figure 32, formant un "chapiteau".
- w_i est continue et à support borné.

u_2^d est définie par une combinaison linéaire des w_i sur une cellule munie de conditions de Bloch. L'interpolation polynomiale entre les nœuds du maillage étant ici linéaire, les w_i , $i \in I$ ainsi construits sont appelés éléments de Lagrange d'ordre 1. Les éléments d'ordre 2, qui ont servi aux simulations qui suivent, sont construits de la même manière, mais en utilisant des polynômes d'ordre 2 pour l'interpolation entre deux nœuds du maillage. Le système algébrique final d'équations linéaires à résoudre s'obtient en introduisant la décomposition de l'Éq. 2.34 dans l'Éq. 2.33. Les fonctions u' de pondération sont prises parmi les fonctions de base du maillage, selon la méthode de Galerkin. Le nombre de scalaires ϑ_i inconnus du système est appelé *nombre de Degrés De Liberté* (DDL) du système. Il correspond au rang de la matrice finale et est généralement très élevé. Le point fondamental de la FEM est que cette matrice est *très creuse* puisque les fonctions de base du maillage sont nulles presque partout. La mise en œuvre de la FEM est décrite en détail dans [85, 84].

Dans le cas scalaire, la puissance actuelle des machines ainsi que l'efficacité des solveurs utilisant le caractère creux des matrices sont telles qu'il est possible de résoudre

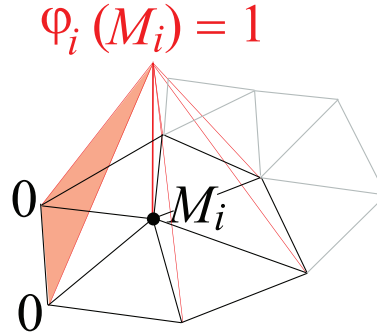


Figure 32: Élément de Lagrange d'ordre 1

de très gros systèmes en utilisant des solveurs directs. Tous les résultats scalaires de cette partie sont établis avec des éléments de Lagrange d'ordre 2 (ou quadratiques) et un solveur direct (UMFPACK).

1.8 Synthèse de la méthode

Afin de donner au lecteur un point de vue général sur la méthode, toutes les informations nécessaires à la mise en œuvre pratique de la méthode des éléments finis ont été rassemblées dans cette partie. En premier lieu, le domaine de calcul Ω (cf. Figure 33) correspond à une période du réseau tronquée selon y en haut et en bas par deux PML, et est donc constitué de $N + 4$ régions dans le cas d'un réseau imbriqué dans un empilement de N couches. De haut en bas, on trouve successivement la PML adaptée au superstrat, le superstrat, les $g - 1$ premières couches de l'empilement, la région des sillons (imbriquée dans la couche indiquée g), les $N - g$ couches de l'empilement, le substrat et la PML adaptée au substrat. Le champ inconnu est la fonction scalaire u_2^d définie en Éq. (2.19).

- Dans la région PML_h (PML adaptée au superstrat),

$$\mathcal{R}_{\underline{\xi}_s^+, \chi_s^+}(u_2^d, u') = 0, \quad (2.35)$$

où $\underline{\xi}_s^+$ et χ_s^+ dépendent des propriétés anisotropes équivalentes de la PML adaptée au superstrat, données par les Éq. (2.7,2.8,2.29,2.30).

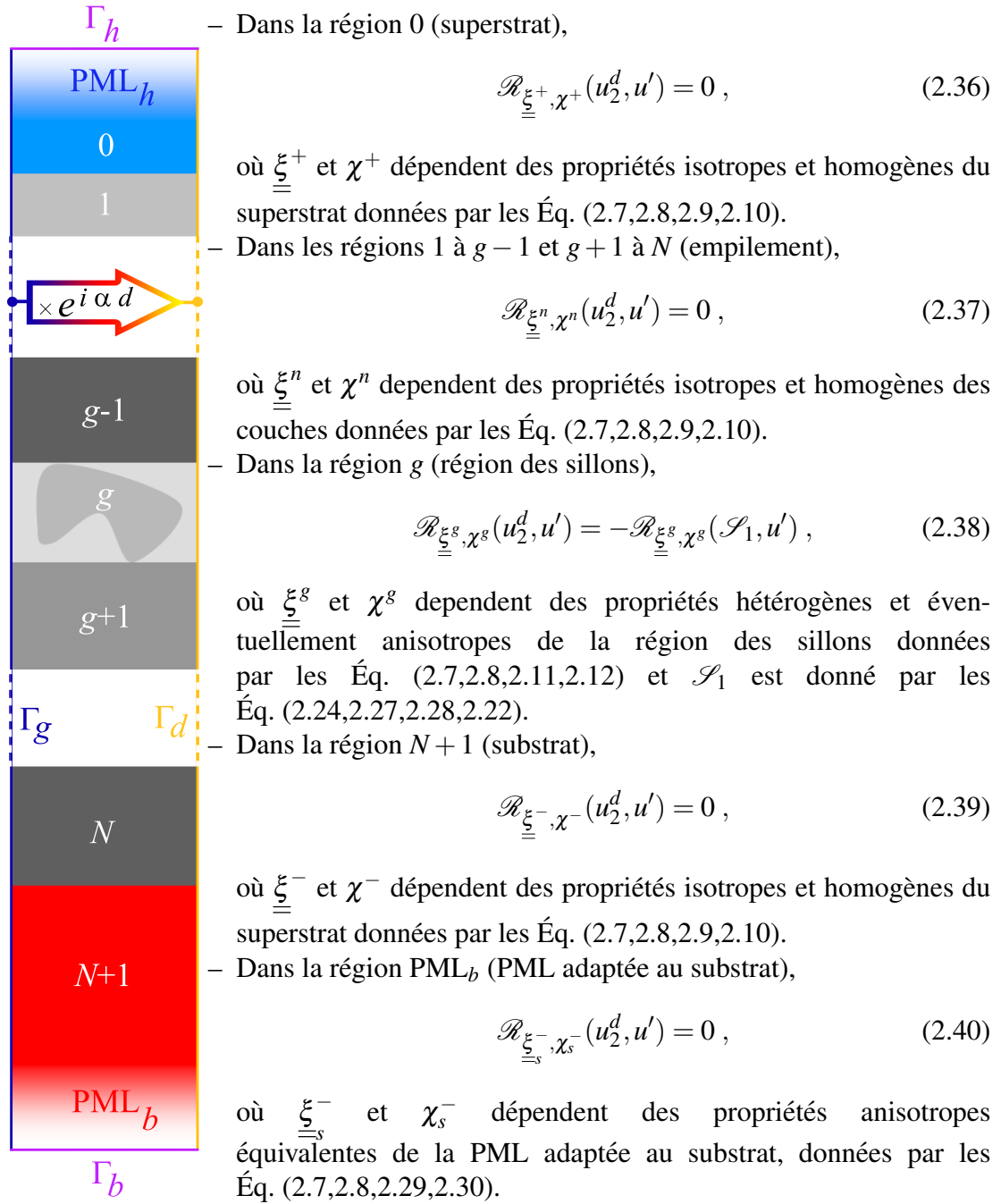


Figure 33: Cellule de calcul

2 Considérations énergétiques

2.1 Ordres de diffraction et efficacités

Le résultat brut du calcul mené par la FEM est le champ total complexe solution de l'Éq. (2.6) en chaque point de la cellule de calcul. Les efficacités de diffraction sont classiquement déduites de u^d (cf. Éq. (2.17)). Comme précédemment, l'exposant $+$ (resp. $-$) correspond à une quantité définie dans le superstrat (resp. substrat).

D'une part, u^d est quasi-périodique selon l'axe Ox et donc décomposable en série de Rayleigh (voir par exemple [75]) :

$$\text{pour } y < y_N \text{ et } y > 0, \quad u^d(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n^d(y) e^{i\alpha_n x} \quad (2.41)$$

où

$$u_n^d(y) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u^d(x, y) e^{-i\alpha_n x} dx \quad \text{avec} \quad \alpha_n = \alpha + \frac{2\pi}{d} n \quad (2.42)$$

D'autre part, introduire l'Éq. (2.41) dans l'équation de Helmholtz, vérifiée dans le superstrat $y > 0$ et le substrat $y < y_N$ permet d'explicitier les coefficients de Rayleigh :

$$u_n^d(y) = \begin{cases} s_n e^{-i\beta_n^+ y} + r_n e^{i\beta_n^+ y} & \text{pour } y > 0 \\ u_n e^{i\beta_n^- y} + t_n e^{-i\beta_n^- y} & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad \text{avec} \quad \beta_n^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^2 \quad (2.43)$$

Avec une dépendance temporelle choisie en $e^{-i\omega t}$, les C.O.S imposent $s_n = u_n = 0$. En combinant l'Éq. (2.42) et l'Éq. (2.43) à une altitude y_c fixée, il vient :

$$\begin{cases} r_n = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u^d(x, y_c) e^{-i(\alpha_n x + \beta_n^+ y_c)} dx & \text{pour } y_c > H \\ t_n = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u^d(x, y_c) e^{-i(\alpha_n x - \beta_n^- y_c)} dx & \text{pour } y_c < 0 \end{cases} \quad (2.44)$$

Ces deux coefficients sont calculés par intégration numérique (méthode des trapèzes) selon x à partir d'une coupe de la carte de champ complexe à l'altitude y_c . La méthode des trapèzes est connue pour être très efficace dans le cas de fonctions périodiques à faible pente (en intégrant sur une période) [86]. La fonction quasi-périodique définie par $u_2^d(x, y_c)$ dont la restriction à une période est effectivement calculée, est de classe C^∞ . D'un point de vue pratique, il apparaît que l'interpolation numérique, sur les

nœuds du maillage, des fonctions périodiques définies par $u_2^d * \exp(-ix\alpha_n)$ conservent un bon comportement vis-à-vis de cette technique numérique d'intégration. On en déduit immédiatement les efficacités de diffraction des ordres propagatifs réfléchis et transmis (R_n et T_n) définis par :

$$\begin{cases} R_n := r_n \bar{r}_n \frac{\beta_n^+}{\beta^\pm} & \text{pour } y_c > 0 \\ T_n := t_n \bar{t}_n \frac{\beta_n^-}{\beta^-} \frac{\gamma^+}{\gamma^-} & \text{pour } y_c < y_N \end{cases} \quad \text{avec } \gamma^\pm = \begin{cases} \mu^\pm & \text{dans le cas TE} \\ \varepsilon^\pm & \text{dans le cas TM} \end{cases} \quad (2.45)$$

Ce calcul est réalisé pour vingt altitudes y_c différentes dans le substrat et le superstrat. Dans les exemples qui suivent seront présentées les valeurs moyennes obtenues pour chaque ordre propagatif transmis ou réfléchi.

Dans la suite, nous nous intéressons au bilan global d'énergie, entre les différents modes diffractés et les pertes, ce qui constitue une vérification supplémentaire de nos calculs (cf. partie 3.2 de ce chapitre).

Des montages optiques de mesure d'efficacités de diffraction existent [87]. Ils reposent sur l'utilisation d'un détecteur mobile sur un arc de cercle centré sur le réseau et s'apparentent, en cela, à des montages de caractérisation de diffusion. Cependant, dans notre cas, les réseaux sont destinés à être embarqués dans des photodiodes de type jonction p/n réalisées dans le silicium. C'est-à-dire que les grandeurs auxquelles nous avons accès facilement expérimentalement sont celles qui sont classiquement utilisées pour décrire la réponse des photo-détecteurs, comme la réponse spectrale $R(\lambda)$ ou l'efficacité quantique $QE(\lambda)$. Nous disposons en effet de bancs adaptés à leur mesure. Nous présentons donc maintenant un modèle simplifié permettant le calcul de ces grandeurs à partir de la carte de champ complexe du champ électrique total dans le silicium.

2.2 Réponse spectrale et efficacité quantique d'une photodiode

Le courant débité par une jonction p/n sous éclairage dépend de l'énergie lumineuse transmise dans le semi-conducteur, de la part absorbée qui donne lieu à la création de paires électron-trou, et du nombre de paires effectivement collectées qui contribuent finalement au photo-courant.

Les grandeurs classiquement utilisées pour décrire la réponse de photo-détecteurs quantiques sont la réponse spectrale $R(\lambda)$, définie comme le rapport entre le photo-

courant débité $I(\lambda)$ par le photo-détecteur et la puissance lumineuse incidente P_{inc} ($R(\lambda) = I(\lambda)/P_{\text{inc}}$, en A/W), ou encore l'efficacité quantique $QE(\lambda)$, sans dimension, définie comme le rapport entre le nombre d'électrons collectés et le nombre de photons incidents. On constate aisément que ces deux grandeurs sont liées, puisque :

$$R(\lambda) = \frac{e \times \text{nombre d}'e^- \text{ collectés/unité de temps}}{h\nu \times \text{nombre de photons incidents/unité de temps}} = \frac{e}{h\nu} QE(\lambda) \quad (2.46)$$

Nous allons donc présenter ici un calcul simplifié de $QE(\lambda)$, mais suffisant pour décrire le comportement spectral des structures de test utilisées pour valider expérimentalement notre code scalaire.

À partir de $\mathbf{E} = e(x,y)\mathbf{z}$ (resp. \mathbf{H}) dans le cas de polarisation TE (resp. TM), on peut d'abord déduire \mathbf{H} de l'Éq. (2.3b) (resp. \mathbf{E} de l'Éq. (2.3a)), puis le vecteur de Poynting moyenné dans le temps, qui correspond à la distribution spatiale de l'intensité :

$$\mathbf{S}_{\text{moy}} = \frac{1}{2} \Re e(\mathbf{E} \times \bar{\mathbf{H}}) \quad (2.47)$$

La densité de puissance W absorbée par unité de volume s'exprime alors, en chaque point (x,y) d'un matériau à pertes :

$$W(x,y) = -\text{div}(\mathbf{S}_{\text{moy}}) \quad (2.48)$$

Enfin, le taux de génération optique G_{opt} , c'est-à-dire le nombre de paires électron-trou créés par unité de volume et par unité de temps en chaque point (x,y) est déduite de W :

$$G_{opt}^n(x,y) = G_{opt}^p(x,y) = G_{opt}(x,y) = \eta \frac{W(x,y)}{E_{ph}} \quad (2.49)$$

où $E_{ph} = \hbar\omega$ est l'énergie du photon et η le nombre d'électrons générés par un photon absorbé ($\eta \simeq 1$ dans l'intervalle spectral d'étude comprenant le visible et le proche IR puisque l'absorption bande-à-bande est alors prédominante).

Sous réserve de certaines hypothèses, on peut expliciter directement $QE(\lambda)$. Pour commencer, la jonction n^+/p est considérée abrupte. On fait ensuite l'approximation que le nombre de porteurs générés est très inférieur aux densités de porteurs majoritaires (hypothèse de faible injection). De plus, seules les paires électron-trou dans la Zone de Charge d'Espace (ZCE) sont prises en compte. Nous négligeons donc les paires électron-trou générées dans les zones quasi-neutres qui pourraient diffuser dans la ZCE (autrement dit, la longueur de diffusion des porteurs minoritaires est considérée

nulle). La *ZCE* est délimitée (voir Figure 30) selon l'axe des y par $y = y_{\text{top}}$ et par $y = y_{\text{bot}} = y_{\text{top}} - \Delta y_{ZCE}$ (Δy_{ZCE} étant la largeur de la Zone de Charge d'Espace). Sous ces hypothèses simplificatrices, dont nous vérifierons qu'elles sont justifiées, le QE s'exprime simplement comme le ratio entre la densité de puissance absorbée dans le "volume" délimité par y_{top} et y_{bot} selon l'axe des y et $\pm d/2$ selon l'axe des x , et P_{inc} :

$$\text{QE}(\lambda) = \frac{\frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} \int_{y_{\text{bot}}}^{y_{\text{top}}} W(x, y, \lambda) dx dy}{P_{\text{inc}}(\lambda)} \quad (2.50)$$

où P_{inc} s'exprime en fonction du champ incident, dans le superstrat (avec \mathbf{n} la normale à Ox , orientée vers les y décroissants) :

$$P_{\text{inc}} = \frac{1}{2d} \int_{-d/2}^{d/2} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{E}^0 \times \overline{\mathbf{H}^0}) dx \quad (2.51)$$

Ce modèle élémentaire donne une expression analytique aisément calculable de $\text{QE}(\lambda)$ et permet de le définir en utilisant seulement des paramètres connus (y_{bot} et y_{top} , imposés par les profils de dopages connus dans la *ZCE*). On pourrait penser à un modèle plus réaliste prenant en compte la diffusion des porteurs, et par ce biais ajouter un paramètre d'ajustement, la longueur de diffusion des porteurs.

3 Validation et illustration numériques de la méthode

3.1 Le réseau mono-dimensionnel partiellement conducteur

On peut se référer à [73] pour tester la précision de notre méthode. Le réseau étudié ici est certes isotrope, mais nous n'avons trouvé aucune référence traitant numériquement le cas de réseaux présentant cette orientation d'anisotropie (z -anisotropie). Le réseau métallique étudié dans [73] grâce à la méthode C et repris dans [88], grâce à une autre formulation de la FEM, présente une section rectangulaire dont les dimensions sont rappelées en Figure 34.

Dans cet exemple, $\varepsilon^+ = 1$ et $\varepsilon^- = \varepsilon^g = -44.9757 + 2.9524i$. L'efficacité réfléchie dans l'ordre 0 est calculée dans les deux cas de polarisation et présentée (voir R_0 dans le Tableau 1) en fonction du raffinement du maillage. On peut quantifier celui-ci par N_M , le nombre d'éléments par lequel est échantillonnée une période du champ dans un

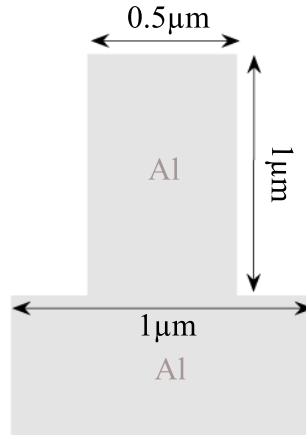


Figure 34: Réseau à sillons rectangulaires : ce motif est répété avec une périodicité $d = 1 \mu\text{m}$. Ce réseau, étudié par [73], est un de nos éléments de référence.

milieu de permittivité relative ε . La taille d'un élément correspond alors au diamètre de son cercle circonscrit et vaut $\lambda / (N_M \sqrt{\varepsilon})$.

Dans cet exemple, il n'est pas utile de faire appel au calcul multi-couches rappelé en Éq. (2.22) puisqu'il suffit de calculer directement le coefficient de réflexion complexe du dioptre pour établir l'expression des termes sources \mathcal{S}_1^p et \mathcal{S}_1^c . L'exposant p (resp. c) pourrait d'ailleurs dans ce cas être rebaptisé 0 (resp. r), la seule onde propagative (resp. contre-propagative) dans le superstrat étant l'onde plane incidente (resp. réfléchie) sur le dioptre.

N_M	R_0^{TE}	R_0^{TM}
4	0.7336765	0.8532342
6	0.7371302	0.8456592
8	0.7347466	0.8482817
10	0.7333739	0.8500710
12	0.7346569	0.8494844
14	0.7341944	0.8483238
16	0.7342714	0.8484774
Résultat donné par [73]	0.7342789	0.8484781

Tableau 1: R_0 en fonction du raffinement du maillage pour les deux cas de polarisation

L'accord relatif entre les deux méthodes est très bon, puisqu'inférieur à 10^{-5} pour $N_M = 16$. Il est important de noter que les valeurs des efficacités sont obtenues avec une précision satisfaisante (deux chiffres significatifs) même dans le cas d'un maillage lâche. Cette propriété remarquable est liée au fait que la formulation faible définie en Éq. 2.33 peut être vue comme une *fonction énergie à minimiser*. Si les valeurs locales du champ peuvent être éloignées de leurs valeurs théoriques dans le cas d'un maillage lâche, les grandeurs énergétiques que sont les efficacités de diffraction sont, elles, beaucoup plus précisément calculées. Ceci constitue un avantage considérable pour qualifier rapidement des configurations géométriquement étendues.

3.2 Le cas z-anisotrope

Considérons à présent un réseau à section trapézoïdale (cf. Figure 35) constitué d'aragonite (CaCO_3) déposé sur un substrat isotrope (SiO_2 , $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 2.25$). En se plaçant selon les axes principaux du cristal anisotrope, son tenseur diélectrique s'écrit [89] :

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \bar{\epsilon}_a & 0 \\ \epsilon_a & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\mu}} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \bar{\mu}_a & 0 \\ \mu_a & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}, \quad (2.52)$$

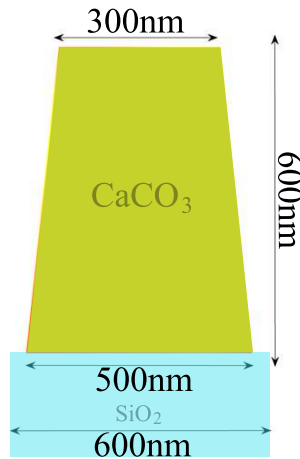


Figure 35: Géométrie du motif. Cet élément est constitué d'aragonite dont le tenseur diélectrique est donné par l'Éq. (2.53) et déposé sur un substrat de silice avec une période $d = 600 \text{ nm}$.

Supposons maintenant que ce cristal d'aragonite ait été déposé avec un angle de $+45^\circ$ par rapport à ses axes naturels et autour de la dimension infinie de notre réseau. Le tenseur diélectrique devient :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_{\text{CaCO}_3}^{+45^\circ} = \begin{pmatrix} 2.592 & 0.251 & 0 \\ 0.251 & 2.592 & 0 \\ 0 & 0 & 2.829 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

Il est utile de rappeler que la méthode développée ici reste inchangée quelle que soit la géométrie de notre motif diffractif. Le domaine de calcul 2D est borné par les PML selon l'axe des y et par la pseudo-période selon l'axe des x . Nous proposons de calculer les efficacités de diffraction résultant d'une illumination de ce réseau par une onde plane de longueur d'onde $\lambda_0 = 633\text{nm}$ dans les deux cas de polarisation TE et TM, et pour différentes incidences (0° , -20° et -40°). Étant donné que $\underline{\underline{\mu}}$ et $\underline{\underline{\epsilon}}$ sont hermitiens, la somme des efficacités des ordres propagatifs transmis et réfléchis doit être égale à 1 puisqu'il n'y a pas de pertes par effet Joule dans ce cas. C'est ce dernier critère qui tiendra lieu de validation numérique, à défaut de valeurs de référence. La différence résiduelle avec la valeur théorique est due à la sommation des erreurs de détermination des efficacités.

Enfin, le maillage est ici choisi de telle sorte que la taille maximale de maille est imposée inférieure à $\lambda_0 / (10\sqrt{\epsilon})$, soit $N_M = 10$. Les efficacités de diffraction sont calculées comme décrit en 2.1.

En incidence normale, le champ h dans le cas TM n'est pas symétrique par rapport à l'axe des y alors qu'il l'est dans le cas TE. On peut en trouver l'illustration en termes d'énergie par l'évidente non symétrie des ordres T_{-1}^{TM} et T_1^{TM} (cf. Tab 2 : 0.322510 *versus* 0.124722), tandis que $T_{-1}^{\text{TE}} = T_1^{\text{TE}} = 0.20313$. On remarque de plus que le rapport d'asymétrie $\frac{0.251}{2.592}$ entre les termes diagonaux et non-diagonaux de $\underline{\underline{\epsilon}}_{\text{CaCO}_3}^{+45^\circ}$ est très inférieur au rapport d'asymétrie optique en incidence normale, i.e. $\frac{T_1 - T_{-1}}{T_1}$.

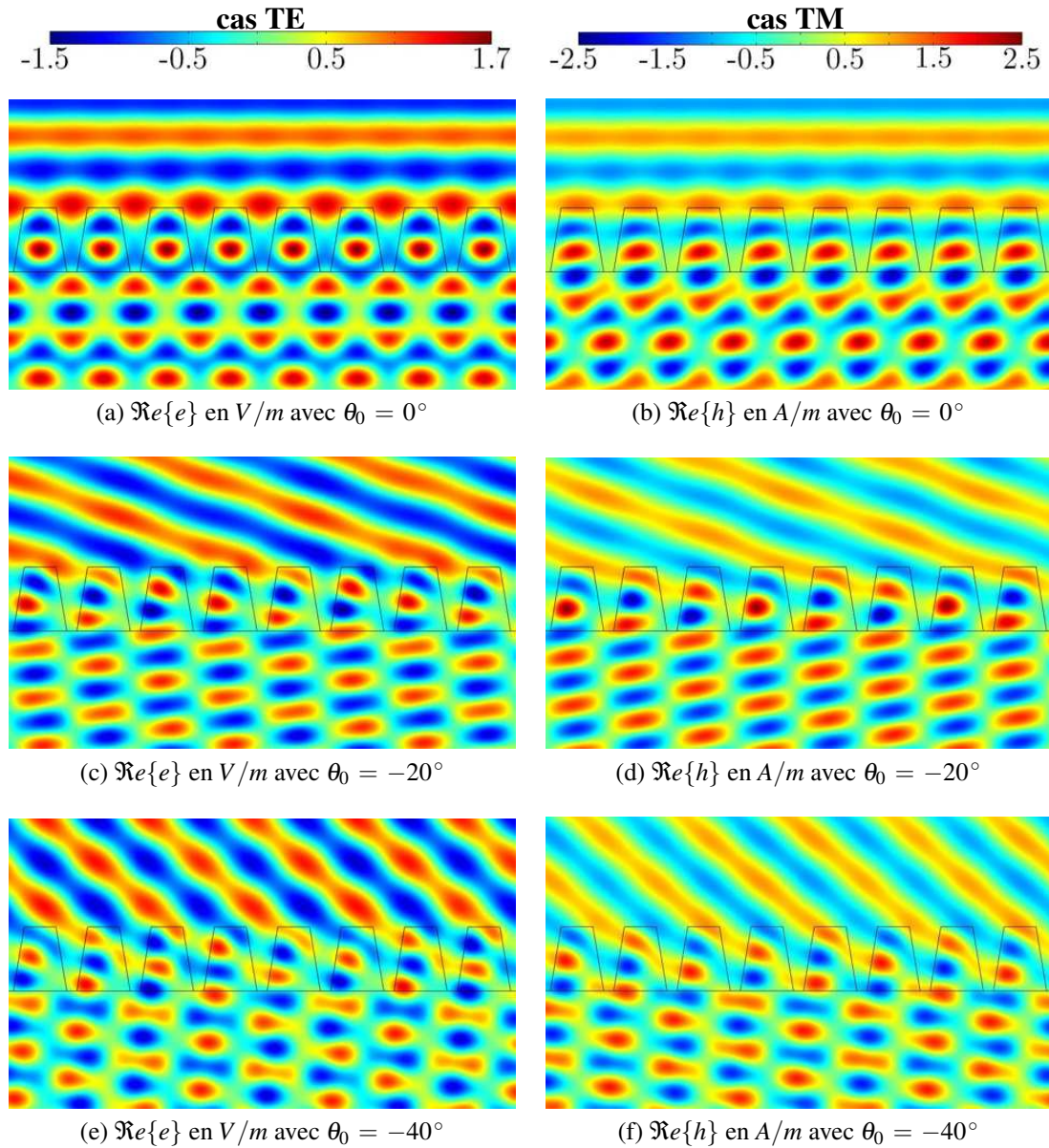


Figure 36: Partie réelle du champ total calculé, en fonction de l'angle d'incidence θ_0 (cas TM et TE).

3.3 Le cas de géométries complexes

Couplée à des algorithmes de détection de contour classiques, notre méthode s'adapte aux géométries les plus variées et offre des perspectives intéressantes en termes de génération automatique de géométries à partir de clichés issus de la microscopie par

TE	T_{-1}	T_0	T_{+1}	T_{+2}	R_0	R_{+1}	TOTAL
0°	0.203176	0.585149	0.203169	-	0.008474	-	0.999969
-20°	0.004629	0.575525	0.399718	-	0.015632	0.004412	0.999916
-40°	-	0.493479	0.420740	0.025050	0.058226	0.002540	1.000035
TM	T_{-1}	T_0	T_{+1}	T_{+2}	R_0	R_{+1}	TOTAL
0°	0.124709	0.538040	0.322471	-	0.014683	-	0.999903
-20°	0.000364	0.444346	0.538704	-	0.011178	0.005370	0.999961
-40°	-	0.541084	0.434221	0.012045	0.007683	0.005031	1.000064

Tableau 2: Efficacités de diffraction des ordres transmis et réfléchis déduites des cartes de champ de la Figure 36

exemple.

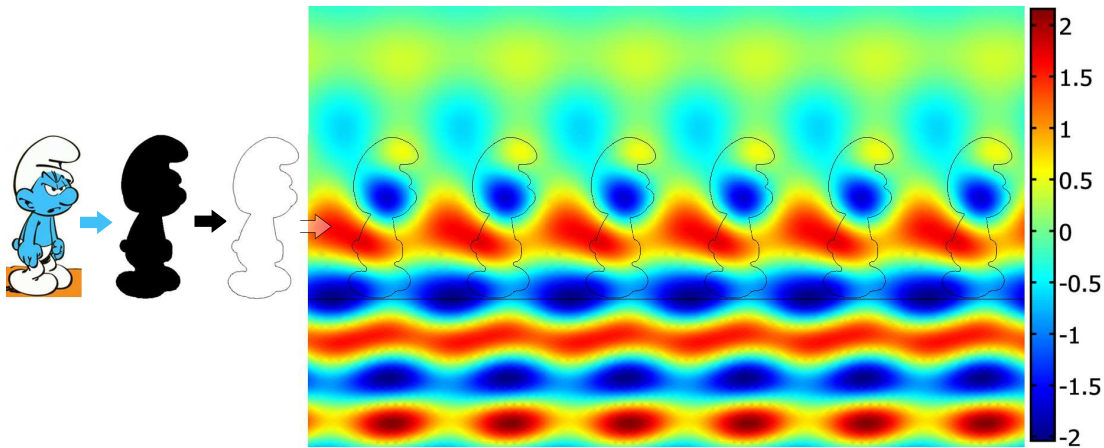


Figure 37: Étapes nécessaires (seuillage en niveaux de gris, puis détection de contour) à l'importation d'une géométrie bidimensionnelle quelconque. À droite, le champ u_2^d résultant dans le cas TE est donné en V/m . Les caractéristiques matérielles et géométriques du réseau de schtroumpfs sont données en légende du Tableau 3

Conclusion partielle

Nous avons développé une nouvelle formulation scalaire de la FEM adaptée au calcul, en régime harmonique, du champ diffracté par un réseau mono-dimensionnel quelconque dans les deux cas de polarisation TE et TM. Les nombres d'éléments diffractifs

TE	R_0	T_{-1}	T_0	T_{+1}	TOTAL
	0.01935	0.21808	0.67052	0.09228	1.0002

Tableau 3: Efficacités de diffractions extraites de la carte de champ de la Figure 37. Les schtroumpfs ont une taille de $0.81\mu\text{m}$, sont constitués de verre ($\epsilon=2.25$) et défilent avec une période de $d=600\text{ nm}$ sur un substrat de même nature. Ils sont illuminés par une onde plane de longueur d'onde $\lambda_0=633\text{ nm}$.

par période, et de couches dans lesquelles ils sont imbriqués sont, en effet, arbitraires. Cette méthode est également indépendante de la géométrie des motifs considérés. Enfin, elle permet l'étude de matériaux dits z -anisotropes. Elle est entièrement basée sur l'utilisation d'éléments finis nodaux d'ordre 2. Nous l'avons validé numériquement en calculant les efficacités de diffraction d'un réseau métallique classiquement étudié. Cette comparaison a permis de montrer la grande précision qu'on peut attendre de cette méthode, si le maillage de la structure est suffisamment raffiné (six chiffres significatifs sur les efficacités pour un maillage à $\lambda/15$). Un aspect, tout aussi important d'un point de vue pratique, est la pertinence des résultats obtenus pour des maillages lâches (deux chiffres significatifs pour un maillage à $\lambda/2$). L'application numérique z -anisotrope a, elle aussi, été validée numériquement par une méthode indépendante (FMM), lors de la publication de [90]. Dans le prochain chapitre, nous étudions la représentativité de notre méthode scalaire en caractérisant spectralement des structures de test CMOS spécialement conçues.

Chapitre 3

Application à la caractérisation de réseaux mono-dimensionnels en technologie CMOS

Dans ce chapitre, on se propose de valider le modèle développé au chapitre 2 à partir de données expérimentales.

1 Présentation de l'expérience

1.1 Structures de test à géométrie bi-dimensionnelle

Deux photodiodes sont à l'étude dans cette partie. Ce sont des structures de référence systématiquement produites sur les plaquettes de silicium (appelées *wafers* en anglais) de développement d'imageurs CMOS à STMicroelectronics. Elles voient donc exactement les mêmes étapes process que les imageurs lors de leur fabrication, mais présentent de grandes dimensions par rapport au pixel. On s'affranchit de la notion de pixel et de dimensions transverses réduites (2.2 μm) nécessitant une représentation tri-dimensionnelle.

- Les *photodiodes multi-couches* sont nos diodes de référence. Elles sont constituées de dix couches diélectriques à faibles pertes déposées sur une photodiode de type n^+/p (Les dimensions de la surface photo-sensible sont données Figure 38). Les permittivités diélectriques relatives $\epsilon_n(\lambda)$ de chaque couche de SiO_2 ou Si_3N_4 formant l'empilement ont été déterminées par ellipsométrie spectrométrique à STMicroelectronics.

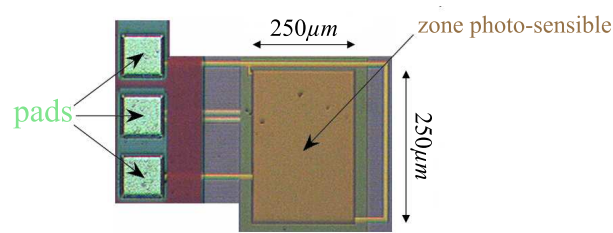


Figure 38: Vue de dessus d'une photodiode (loupe binoculaire).

- Les *photodiodes à réseaux de cuivre enterrés* sont fabriquées selon les mêmes étapes que les diodes précédentes. Elles diffèrent uniquement de leurs homologues par l'ajout d'un réseau de cuivre, ayant nécessité au préalable le dessin d'un niveau de masque spécifique, au niveau du premier étage d'interconnexions métalliques (généralement baptisé M1). La période d , l'épaisseur et la largeur des lignes ont été mesurées au SEM (Scanning Electron Microscopy). L'ordre de grandeur de leur largeur est la centaine de nanomètres, tandis que celui de leur longueur est la centaine de microns. On peut donc légitimement représenter le problème en deux dimensions. De plus, quelques milliers de lignes sont dessinées, la géométrie peut donc être considérée comme périodique.

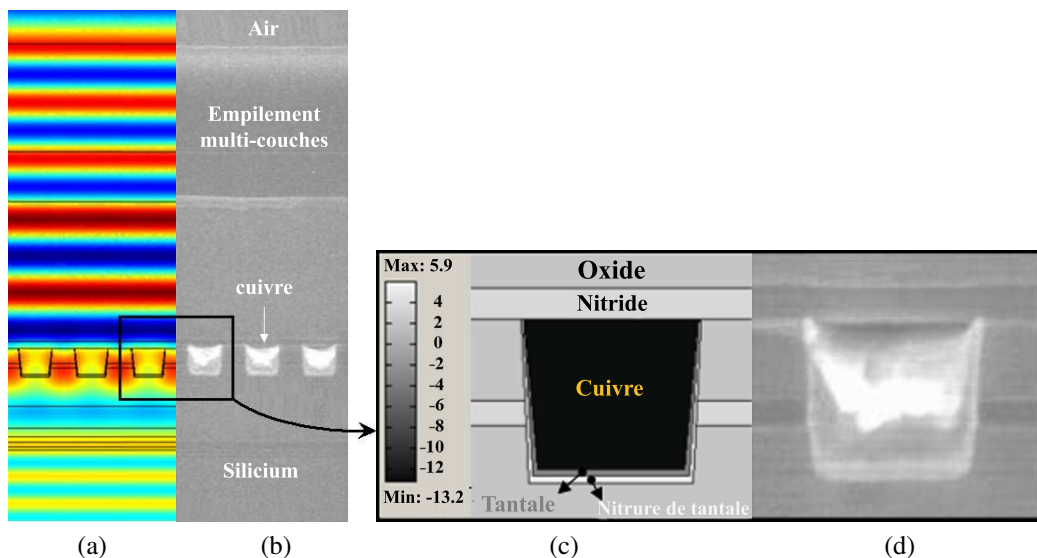


Figure 39: Vues au SEM (b,c,d) d'une photodiode équipée d'un réseau de cuivre et carte du champ électrique total (a)

La Figure 39b montre une vue en coupe du réseau et sa localisation dans l'empilement multi-couches. Sur la Figure 39a, est représentée, en échelle de couleurs, la partie réelle du champ total $\Re\{e\}$ pour $\lambda = 650$ nm. La Figure 39d est une coupe, vue au SEM, plus détaillée d'une ligne de cuivre tandis que la Figure 39c illustre la complexité de sa modélisation tant géométrique que physique (en niveaux de gris est représentée la partie réelle de ϵ_r pour $\lambda = 650$ nm). Les lignes de cuivre sont entourées d'une barrière de tantale/nitru de tantale (Ta/TaN) et recouvertes d'une couche de nitru de silicium (Si_3N_4) qui permettent de les isoler du silicium. Ces couches supplémentaires sont indispensables au bon comportement électrique de la puce : le cuivre parcouru par un courant a tendance à diffuser dans le substrat et à contaminer le silicium par électro-diffusion. Les permittivités diélectriques relatives du tantale et du nitru de tantale dans le domaine du visible peuvent être trouvées dans [91]. Celles du cuivre et du silicium sont extraites pour ce modèle de [92]. Toutes les autres résultent de mesures spectrométriques réalisées à STMicroelectronics.

Pour éviter la diaphotie optique, on cherchera de manière générale à rester dans l'ordre zéro de diffraction sur tout l'intervalle spectral d'étude. La période des motifs doit donc être maintenue en dessous de $350/n \approx 240$ nm, où n est la partie réelle de l'indice optique du matériau situé sous le réseau. La technologie utilisée pour la fabrication de ces structures de test impose des lignes de cuivre de largeur minimale 120nm, avec un espacement entre deux lignes de 120nm. Ces paramètres ont donc naturellement été adoptés pour le réseau de test (soit $d = 240$ nm). L'épaisseur des lignes au niveau M1 est de même imposée par la technologie employée et fixée à 150nm. On ne cherche pas ici à concevoir un filtre adapté à gabarit donné, mais à retrouver les efficacités quantiques de ces photodiodes.

1.2 Étude spectrale : Banc de mesure d'Efficacité Quantique

La Figure 40 est un schéma du banc de caractérisation utilisé entre autre pour la mesure de $\text{QE}(\lambda)$. La source est une lampe halogène blanche de 250W. Une bande spectrale de 10nm est sélectionnée dans cette source par l'intermédiaire d'un mono-chromateur et injectée dans une fibre optique. Le flux émergent de la fibre est ensuite collimaté et focalisé dans un trou source de diamètre réglable. Un polariseur permet alors de

sélectionner le cas de polarisation (TE/TM). Le faisceau est à nouveau collimaté et dirigé vers un cube séparateur de flux. Un des bras sert au contrôle de la puissance optique P_{inc} incidente sur la structure. Enfin, sur l'autre bras, le faisceau est focalisé sur l'échantillon grâce à un objectif de microscope de grossissement 5. La mesure électrique est réalisée directement sur le wafer en s'appuyant au moyen de micro-pointes sur les trois pads montrés Figure 38. Un des pads est connecté à la cathode et les deux autres à l'anode de la photodiode pour une collection plus homogène des électrons. Le spectre visible est balayé par pas de 5nm de 400nm jusqu'à 750nm.

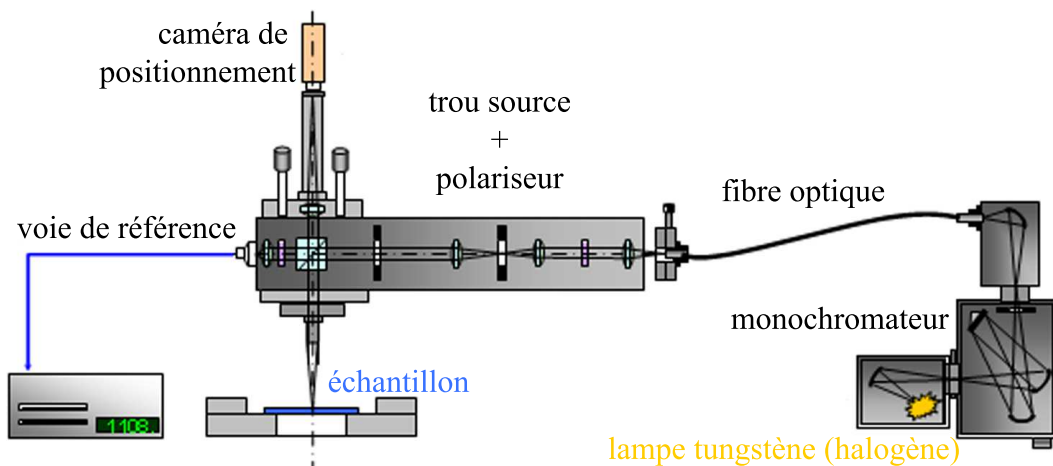


Figure 40: Représentation schématique du banc de mesure de QE

2 Confrontation du modèle aux résultats expérimentaux

2.1 Grandes photodiodes sans réseau

La Figure 41 présente l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde incidente, calculée à partir du modèle du chapitre 2 (en pointillés) et mesurée (trait plein). Le calcul de type couches minces et l'expérience présentent un bon accord, et ce, sans aucun paramètre d'ajustement. Les approximations faites en 2.2 sont donc légitimes dans le cas des grandes diodes. L'ouverture de la source est ici négligée : la courbe en pointillés correspond à la réponse de l'empilement déposé sur silicium à une onde plane en incidence normale, obtenue en utilisant Éq. (2.22) et Éq. (2.50). Soulignons que la qualité de l'accord repose en grande partie sur le fait que les épaisseurs

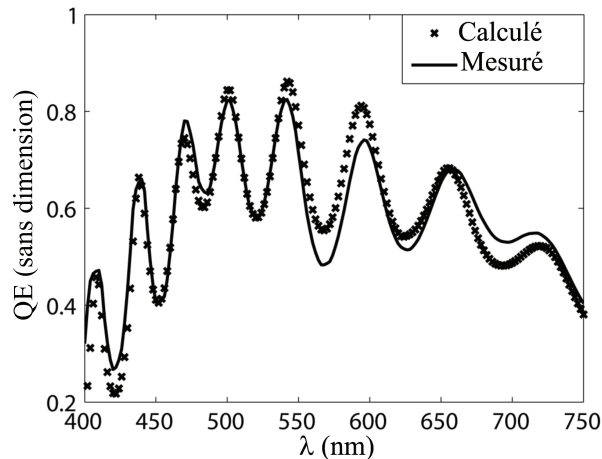


Figure 41: QE mesuré (trait plein) et QE calculé (trait en pointillé)

(resp. les permittivités diélectriques relatives) de chaque couche ont été déterminées préalablement par mesure SEM (resp. spectrométrie ellipsométrique). Les différences entre théorie et expérience, notamment à partir de 550nm, peuvent être expliquées par le fait que les épaisseurs et les permittivités de chaque couche ont été mesurées localement, et qu'il n'est pas exclu qu'elles varient légèrement spatialement. Mais surtout, la diffusion des porteurs minoritaires a été négligée pour le calcul du QE (cf. partie 2.2, au chapitre 2). L'influence de la diffusion des porteurs se fait sentir préférentiellement pour les grandes longueurs d'onde.

Notons enfin que le maximum de la courbe de QE atteint 0.9. La forte modulation obtenue est quant à elle due aux interférences optiques dans le multi-couches et aux diverses valeurs de permittivité relative le constituant (silicium, nitrure, oxyde).

2.2 Larges photodiodes avec réseau mono-dimensionnel enterré

Les niveaux de QE obtenus avec la photodiode munie d'un réseau de cuivre à l'étage M1 sont beaucoup plus faibles. (sur la Figure 42 : 0.1 contre 0.9 sans le réseau en termes de maximum). Toutefois, le modèle développé permet de retrouver ces niveaux ainsi que les variations relatives globales sans aucun paramètre d'ajustement. Les écarts entre les données calculées et mesurées sont sensiblement supérieurs au cas 2.1. On peut expliquer ces écarts par l'utilisation, lors du calcul, de valeurs de permittivités pour le tantale [91], le nitrure de tantale [91] et le cuivre [92] ne provenant pas

de mesures physiques sur les matériaux réellement présents dans cette technologie, comme c'est le cas pour tous les autres matériaux. Dans [91], les auteurs ont effectué les mesures d'indice optique sur les mêmes matériaux Ta et TaN correspondant à un process CMOS et par spectroscopie ellipsométrique également. Cependant, les conditions de dépôt (substrat utilisé, épaisseur de la couche déposée, température de dépôt... [91]) et de gravure différent d'un process à l'autre et peuvent modifier structurellement le matériau, changeant alors significativement ses caractéristiques diélectriques.

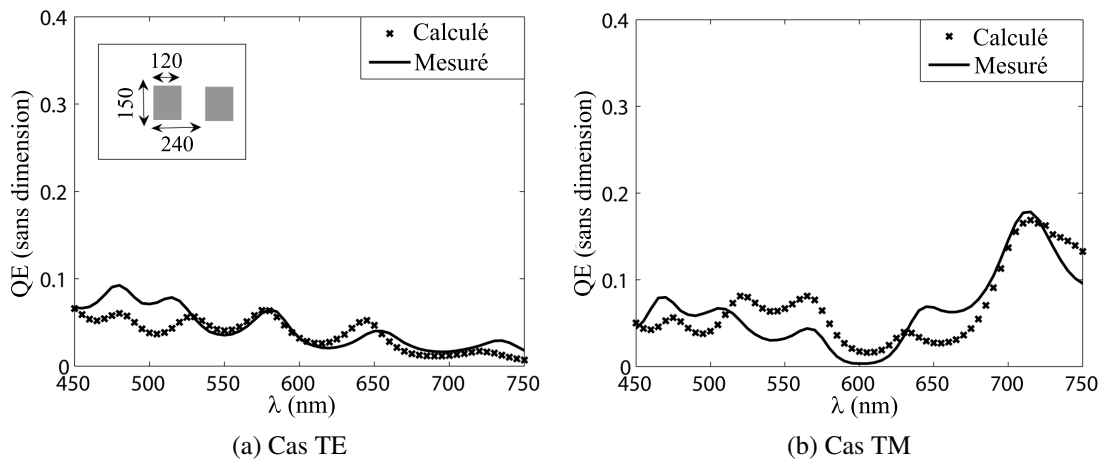


Figure 42: QE mesuré (trait plein) et QE calculé (trait en pointillé). En haut à gauche, une représentation très schématique rappelle les paramètres principaux du réseau (données en nanomètres).

2.3 S'affranchir numériquement des contraintes de procédés de fabrication pour augmenter la transmission du réseau

Le contrôle de la transmission d'un réseau en ajustant ses paramètres principaux laisse entrevoir la possibilité de créer une large gamme de filtres. Dans cette partie, on s'affranchit des règles de process et des contraintes dimensionnelles imposées par la technologie utilisée. On montre que dans ces conditions idéales, les niveaux de QE obtenus en 2.2 peuvent être augmentés à des niveaux exploitables pour l'imagerie. Les paramètres géométriques fondamentaux du réseau ainsi que les matériaux utilisés dans l'empilement sont notamment à l'étude.

2.3.1 Barrière de diffusion

Étant donné la forte dépendance de la transmission aux phénomènes surfaciques lors de l'emploi de réseaux métalliques, le cloisonnage du réseau de cuivre dans un caisson de matériaux à pertes est néfaste à tout phénomène résonnant invoquant le cuivre et conduit à une baisse de QE. Or, la partie imaginaire de la permittivité relative du tantale est bien plus élevée que celle du cuivre aux fréquences optiques. En l'absence de barrière de diffusion, les maxima de $QE(\lambda)$ se trouvent multipliés par un facteur 4 (resp. 2) dans le cas TE (resp. TM) comme le montre la Figure 43. C'est donc bien les

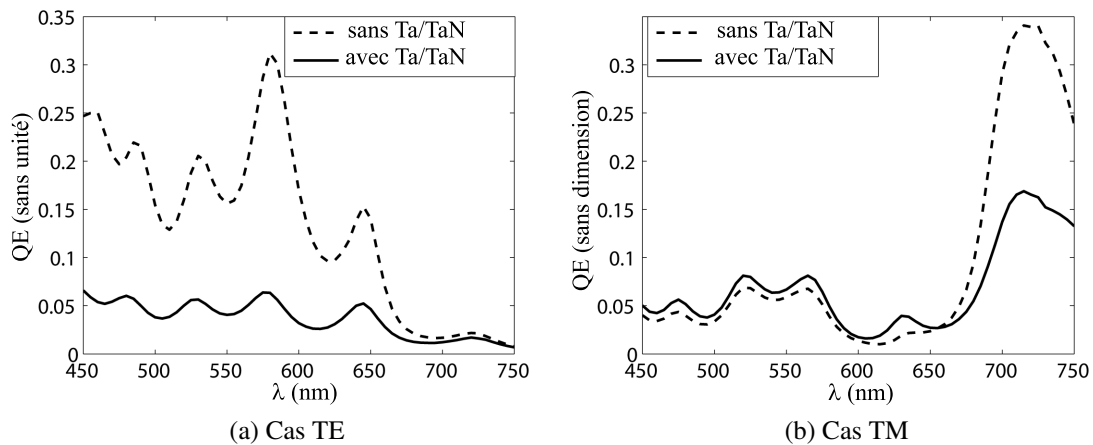


Figure 43: QE calculé avec (trait plein) et sans (trait pointillé) barrière de diffusion Ta/TaN.

couches Ta/TaN qui sont responsables des faibles QE mesurés sur nos dispositifs.

2.3.2 Perspective offertes par l'évolution des technologies

L'empilement peut être raisonnablement modifié puisque sur le dessin du pixel réel, la couche supérieure de l'empilement (baptisée nitrure de passivation) est généralement enlevée sur le trajet de propagation de la lumière. D'ailleurs, plus généralement, toutes les couches de Si_3N_4 sont enlevées du chemin optique afin d'éviter les sauts d'indices, et cela, même si un niveau de masque supplémentaire est nécessaire. Supposant que le cuivre ne diffuse pas dans la puce, la Figure 44 montre le calcul QE en l'absence de barrière de diffusion et de couche de passivation. Il sera possible de réaliser

dans peu de temps des lignes de cuivre à des dimensions plus petites que celle (minimales aujourd'hui) présentées en 2.2. On peut donc vraisemblablement imaginer un réseau dont la période serait de 200nm, la largeur des lignes de 90nm et l'épaisseur des lignes de 100nm. Toutes les couches de nitrure peuvent aussi être enlevées. La courbe en pointillés représente ce qui serait obtenu en utilisant le même empilement multi-couches mais sans réseau et recouvert d'un filtre polymère (filtre par absorption, Figure 44c) rouge utilisé dans le process actuel des imageurs. La courbe en pointillés fins rappelle le résultat obtenu pour le réseau aux dimensions les plus petites actuellement réalisables, avec barrière de diffusion en Ta/TaN et couches de passivation en nitrure (2.2). En matière de performances, la transmission du filtre diffractif reste

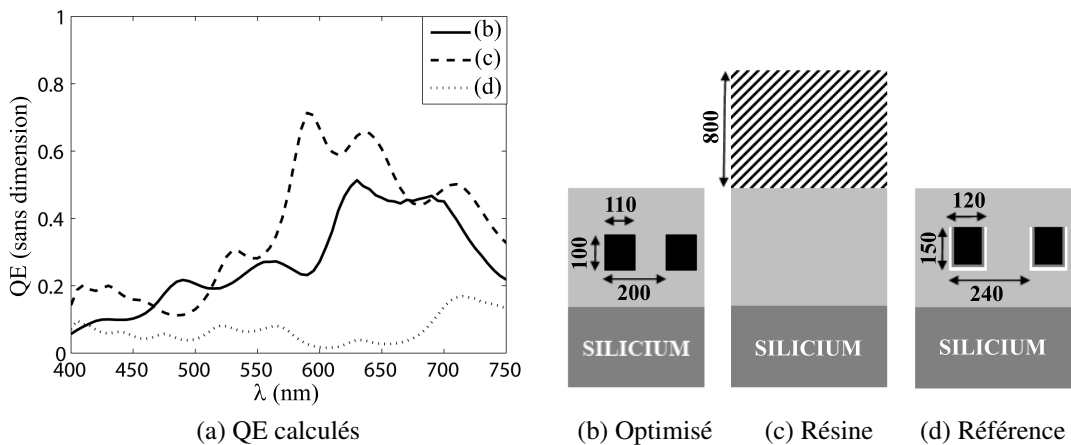


Figure 44: Comparaison des Efficacités Quantiques (cas de polarisation TM) pour les trois configurations géométriques rappelées schématiquement en (b), (c) et (d) (dimensions données en nanomètres).

en deçà de celle du filtre par absorption (0.5 au lieu de 0.7 en termes de QE). Nous serions cependant capables, en nous affranchissant de quelques contraintes process et en anticipant quelque peu l'évolution naturelle de la technologie employée, de gagner considérablement en transmission (voir la courbe en pointillés de la Figure 44a comparée à celle en pointillés fins). Enfin, l'empilement a été réduit de moitié en utilisant un réseau métallique plutôt qu'une résine telle qu'utilisée actuellement. Dans un contexte où les dimensions transverses du pixel tendent à diminuer drastiquement (1.75 μ m, 1.4 μ m et en dessous), ce type de filtre peut constituer une piste intéressante

pour prévenir les baisses de résolution dues à la diaphotie optique, engendrée par un pixel trop "profond".

3 Réseaux de silicium polycristallin

Le modèle scalaire développé permet donc de calculer le comportement spectral des structures de test mono-dimensionnelles CMOS. Il peut donc légitimement être exploité pour la recherche de matériaux et de paramètres opto-géométriques adaptés au filtrage couleur RVB.

En s'inspirant, notamment, des réalisations de Kanamori *et al.* [48] succinctement exposées au chapitre 1, nous avons dégagé des paramètres intéressants concernant les réseaux de silicium polycristallin. Placés au dessus de l'empilement diélectrique, et avec les paramètres géométriques donnés en Figure 45b, le calcul donne, dans le cas de polarisation TE, les profils spectraux passe-bandes présentés en Figure 45a.

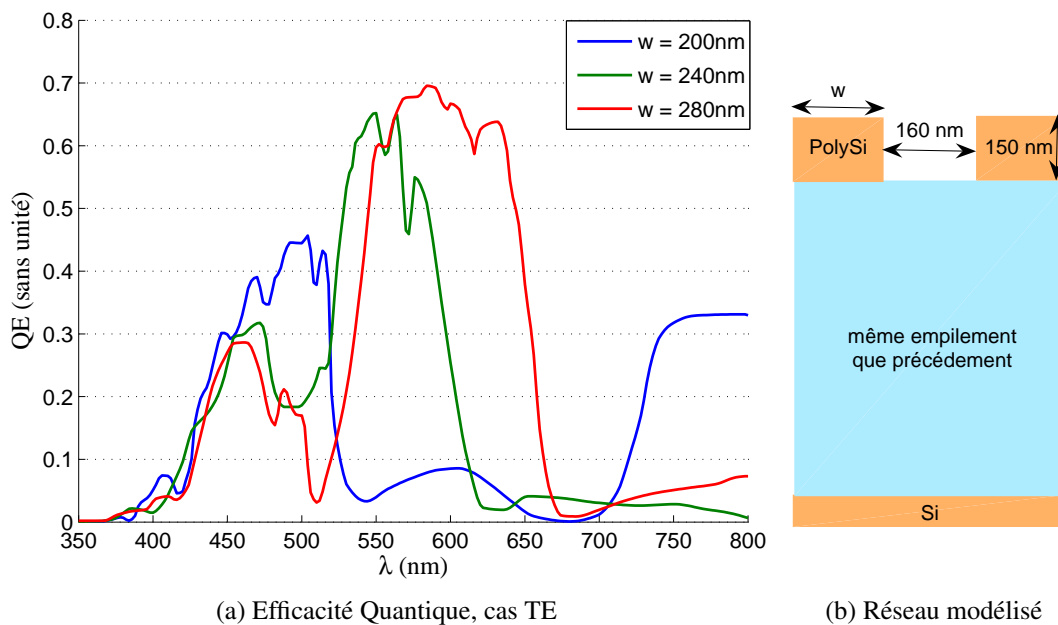


Figure 45: $QE(\lambda)$ dans le visible pour trois valeurs de w , la largeur de la ligne de PolySi

Des structures de grande taille ont été fabriquées, avec pour support les mêmes photodiodes qu'en partie 1.1. Malheureusement, ces structures se sont égarées (*sic*) dans les méandres du circuit de production et nous n'avons pas pu les caractériser.

Conclusion partielle

Grâce à des structures de test diffractives présentant un axe d'invariance et à leur caractérisation en lumière polarisée, nous avons, dans ce chapitre, montré que notre outil scalaire, développé au chapitre 2, est adapté à l'étude spectrale de structures complexes CMOS. En effet, nous avons retrouvé les efficacités quantiques de photodiodes munies de réseaux mono-dimensionnels. Pour cela, il est indispensable de connaître les permittivités complexes des matériaux employés ainsi que la géométrie effectivement construite le plus précisément possible. L'idéal, pour les permittivités, est de disposer de mesures ellipsométriques réalisées dans les mêmes conditions de dépôt (température, vitesse et substrat de dépôt, épaisseur de la couche...), et pour la géométrie, d'images SEM bien contrastées et précises. Le choix de l'utilisation du cuivre, bien que peu utilisé pour le filtrage diffractif dans la littérature, s'est imposé à nous par le fait qu'il s'agit d'une possibilité évidente d'introduire facilement des réseaux métalliques dans l'empilement. De plus, les premières simulations, ne prenant pas en compte le bi-couche Ta/TaN de protection contre la diffusion du cuivre, donnaient des niveaux de transmission élevés. Il est apparu que le tantale, très absorbant dans le visible mais indispensable au fonctionnement de la puce, faisait chuter ces niveaux. Mais l'étude, dans ce chapitre, ne portait pas sur la conception de filtres à proprement parler, puisque leur réponse est très sensible à la polarisation incidente dans le cas mono-dimensionnel, mais plutôt sur la capacité de notre méthode scalaire à modéliser une structure diffractive en technologie CMOS. Ce chapitre a fait l'objet d'une publication [93]. Dans le chapitre suivant, nous étendons les concepts développés au chapitre 2 au cas vectoriel de la diffraction d'une onde plane, d'angle d'incidence et de polarisation arbitraires, par un réseau bi-dimensionnel quelconque.

Chapitre 4

Formulation vectorielle de la FEM adaptée à l'étude de réseaux croisés quelconques

Si le problème de diffraction des ondes électromagnétiques par un réseau mono-dimensionnel est abondamment traité dans le cas scalaire et même conique, il existe peu de méthodes numériques permettant le calcul vectoriel du champ diffracté par un réseau bi-dimensionnel. On peut notamment se référer aux travaux de Moharam *et al.*[94] pour une description de la méthode dite rigoureuse des ondes couplées (*Rigorous Coupled Wave Method*, RCWA), méthode aussi connue sous le nom de méthode modale de Fourier (*Fourier Modal Method*, FMM, voir Li *et al.* [61] et Nojonen *et al.* [95]). Les travaux récents de Schuster *et al.*[96] combinent les résultats de Moharam *et al.* avec ceux de Popov *et al.* [97] pour améliorer la convergence de la méthode différentielle introduite en 1978 [98, 99]. Ces deux méthodes très proches font actuellement partie des plus employées pour la modélisation de réseaux bi-dimensionnels car moins gourmandes en ressources de calcul. On peut encore citer la méthode de transformation de coordonnées (ou méthode C [100, 101, 102] dont on doit les plus récents développements à Harris *et al.* [103], la méthode de Rayleigh [104] et la méthode de variation de frontière (Bruno *et al.* [105, 106]). Enfin, la FDTD (*Finite-difference time-domain* en anglais, [66, 107]) permet d'effectuer des calculs vectoriels de champs électromagnétiques, mais c'est une méthode qui repose sur la propagation numérique d'une impulsion le long d'une grille temporelle. De ce fait, la FDTD est moins adaptée au domaine harmonique. C'est, néanmoins, une méthode largement répandue [74, 108, 109, 110, 111].

Il n'a jamais été montré que la FEM pouvait être adaptée au calcul des efficacités de diffraction d'un réseau croisé. Volakis *et al.* [112] en ont écrit une formulation pour des problèmes tri-dimensionnels de diffusion. En 2007, Wei *et al.* ont écrit une autre formulation pouvant s'adapter à ces problèmes de diffusion et suggéré qu'elle s'appliquait aussi aux problèmes bi-périodiques, mais sans l'illustrer concrètement.

Nous proposons donc, ici, une nouvelle méthode intégralement basée sur la méthode des éléments finis de volumes qui est une généralisation vectorielle du cas scalaire développé en 1. Comme en 2D, cette méthode présente l'avantage de ne pas dépendre de la géométrie de l'élément diffractif, là où toutes les méthodes citées ci-dessus nécessitent des ajustements selon la présence de bords verticaux ou de géométries non analytiquement descriptibles. Elle est donc appropriée à la modélisation du pixel CMOS. Enfin, même avec un maillage lâche ($\lambda/2$) nécessitant peu de ressources de calcul, les bilans énergétiques obtenus restent très précis (2 chiffres significatifs).

1 Développements théoriques

1.1 Définition du problème vectoriel et notations

On note \mathbf{x} , \mathbf{y} et \mathbf{z} les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonales $Oxyz$. La Figure 46 représente le type de structure à l'étude dans cette partie, dans le cas d'un seul élément diffractif par période, pour une meilleure lisibilité. Le choix de l'axe Oz comme axe de propagation de la lumière peut sembler contradictoire avec les notations du Chapitre 2. Il correspond aux notations les plus utilisées lors de la représentation de phénomènes optiques en 3D. Seul le régime harmonique sera ici abordé et les champs électriques et magnétiques seront par conséquent représentés par des vecteurs complexes notés \mathbf{E} et \mathbf{H} avec une dépendance temporelle choisie en $\exp(-i\omega t)$. Enfin, les champs de tenseurs de permittivité relative $\underline{\underline{\epsilon}}$ et de perméabilité relative $\underline{\underline{\mu}}$ peuvent varier continûment (resp. de façon discontinue) dans l'élément diffractif, autorisant l'étude de *réseaux croisés à gradient d'indice* (resp. *saut d'indice*).

Les structures à l'étude peuvent être décomposées en plusieurs sous-domaines, représentés en Figure 46 :

- *Le superstrat* ($z > z_0$) est supposé linéaire, homogène, isotrope et sans pertes, donc caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ϵ^+ et sa perméabilité

- magnétique relative μ^+ . On note $k^+ := k_0 \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+}$ le module du vecteur d'onde.
- *L'empilement multi-couches* ($z_0 < z < z_N$) est composé d'un empilement de N couches supposées linéaires, homogènes et isotropes, caractérisées par leur permittivité diélectrique relative ε_n , leur perméabilité magnétique relative μ_n et leur épaisseur e_n . On note $k_n := k_0 \sqrt{\varepsilon_n \mu_n}$ pour n entier de 1 à N .
 - *La région des sillons* ($z_{g-1} < z < z_g$) qui est imbriquée dans la couche numérotée g (ε_g, μ_g) du domaine décrit ci-dessus. On se limitera dans ce développement au cas isotrope. Cette région hétérogène est donc décrite par des champs scalaires $\varepsilon_{g'}(x, y, z)$ et $\mu_{g'}(x, y, z)$. Notons aussi que ces champs peuvent être constants par morceaux. La périodicité des sillons selon Ox (resp. Oy) est notée d_x (resp. d_y).
 - *Le substrat* ($z < z_N$) est supposé linéaire, homogène et isotrope, caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε^- et sa perméabilité magnétique relative μ^- . On note $k^- := k_0 \sqrt{\varepsilon^- \mu^-}$.

Précisons ici que cette restriction aux matériaux isotropes n'est en aucun cas indispensable mais simplifie la présentation du développement de la méthode. Choisir des matériaux complètement anisotropes pour la région des sillons, ou les couches de l'empilement, est tout à fait possible. La formulation faible associée au problème comprendrait des termes supplémentaires mais cela ne rajouterait pas de degré de liberté supplémentaire au système final.

Les permittivités relatives présentées ci-dessus peuvent être complexes, autorisant l'étude de couches à pertes. Le champ incident sur cette structure est noté :

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = \mathbf{A}^0 \exp(i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}) \quad (4.1)$$

avec

$$\mathbf{k}^+ = \begin{vmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \\ \gamma_0 \end{vmatrix} = k^+ \begin{vmatrix} -\sin \theta_0 \cos \varphi_0 \\ -\sin \theta_0 \sin \varphi_0 \\ -\cos \theta_0 \end{vmatrix} \quad (4.2)$$

et

$$\mathbf{A}_0^e = \begin{vmatrix} E_x^0 \\ E_y^0 \\ E_z^0 \end{vmatrix} = A^e \begin{vmatrix} \cos \psi_0 \cos \theta_0 \cos \varphi_0 - \sin \psi_0 \sin \varphi_0 \\ \cos \psi_0 \cos \theta_0 \sin \varphi_0 + \sin \psi_0 \cos \varphi_0 \\ -\cos \psi_0 \sin \theta_0 \end{vmatrix} \quad (4.3)$$

où $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$, $\theta_0 \in [0, \frac{\pi}{2}]$ et $\psi_0 \in [0, \pi]$.

Dans cette partie, on choisit arbitrairement de calculer le champ \mathbf{E} , le champ \mathbf{H} pouvant être déduit de Éq. (2.3a). En introduisant Éq. (2.3a) dans Éq. (2.3b), le

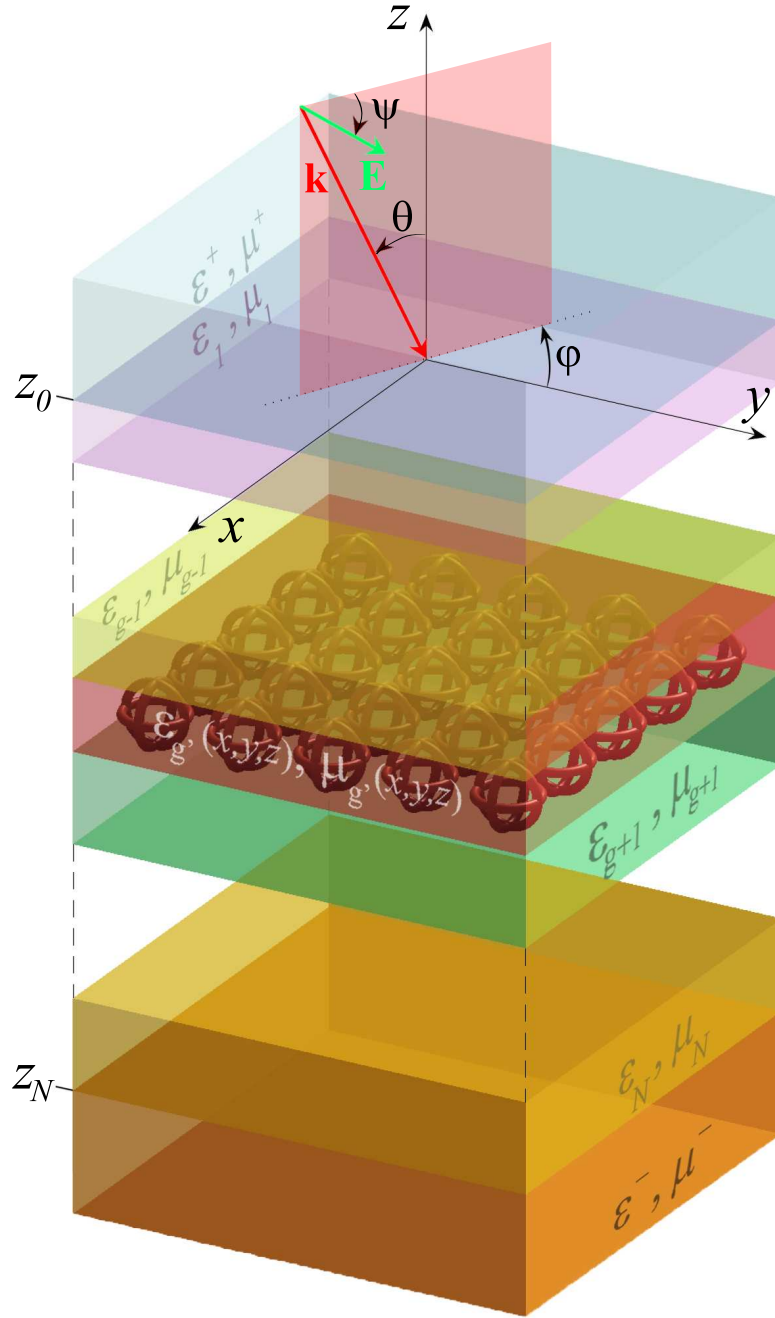


Figure 46: Schéma et notations de la structure tri-dimensionnelle étudiée

problème de diffraction revient à trouver l'unique \mathbf{E} solution de l'équation de propagation vectorielle :

$$\mathbf{L}_{\varepsilon_r, \mu_r} := -\text{rot}(\mu_r^{-1} \text{rot} \mathbf{E}) + k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad (4.4)$$

tel que le champ diffracté vérifie une COS (Condition d'Onde Sortante) et où \mathbf{E} est une fonction quasi-périodique selon x et y .

1.2 Passage d'un problème de diffraction à un problème radiatif à sources localisées

Les champs de scalaires de permittivité relative ε et de perméabilité relative μ associés à la structure peuvent donc être décrits à l'aide de fonctions définies par morceaux et des notations prises en 1.1 :

$$v(x, y, z) := \begin{cases} v^+ & \text{pour } z > 0 \\ v^n & \text{pour } z_{n-1} > z > z_n \text{ avec } 1 \leq n < g \\ v^{g'}(x, y, z) & \text{pour } z_{g-1} > z > z_g \\ v^n & \text{pour } z_{n'-1} > z > z'_n \text{ avec } g < n' \leq N \\ v^- & \text{pour } z < z_N \end{cases} \quad (4.5)$$

avec :

$$v = \{\varepsilon, \mu\} \quad , \quad z_0 = 0 \quad \text{et} \quad z_n = -\sum_{l=1}^n e_l \quad \text{pour } 1 \leq n \leq N \quad (4.6)$$

Comme au chapitre 2, il est à présent utile d'introduire deux fonctions définies par morceaux ε_1 et μ_1 décrivant le cas de l'empilement multi-couches invariant selon Ox et Oy :

$$v_1(x, y, z) := \begin{cases} v^+ & \text{pour } z > 0 \\ v^n & \text{pour } z_{n-1} > z > z_n \text{ avec } 1 \leq n \leq N \\ v^- & \text{pour } z < z_N \end{cases} \quad (4.7)$$

On note enfin \mathbf{E}_0 la restriction de \mathbf{E}^{inc} au superstrat :

$$\mathbf{E}_0 := \begin{cases} \mathbf{E}^{\text{inc}} & \text{pour } z > z_0 \\ \mathbf{0} & \text{pour } z < z_0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Le problème de diffraction dans le cas vectoriel revient donc à rechercher l'unique champ de vecteur \mathbf{E} solution de :

$$-\mathbf{L}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}) = \mathbf{0} \quad \text{tel que } \mathbf{E}^d := \mathbf{E} - \mathbf{E}_0 \text{ satisfait une C.O.S.} \quad (4.9)$$

Pour se ramener à un problème radiatif, un champ de vecteur intermédiaire noté \mathbf{E}_1 est nécessaire et défini comme l'unique solution de :

$$\mathbf{L}_{\varepsilon_1, \mu_1}(\mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \quad \text{tel que } \mathbf{E}_1^d := \mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_0 \text{ satisfait une C.O.S.} \quad (4.10)$$

Le champ de vecteur \mathbf{E}_1 correspond à un *problème annexe* associé au *cas général vectoriel de l'empilement multi-couches* et peut être calculé *indépendamment*. Ce calcul vectoriel est rarement traité dans la littérature, nous en présentons donc un développement en annexe A. \mathbf{E}_1 sera donc désormais *considéré comme connu*. C'est ici qu'est introduit le champ de vecteur \mathbf{E}_2^d qui sera effectivement calculé grâce à la FEM et simplement défini comme la différence entre \mathbf{E} et \mathbf{E}_1 :

$$\mathbf{E}_2^d := \mathbf{E} - \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}^d - \mathbf{E}_1^d. \quad (4.11)$$

Tenant compte de ces nouvelles définitions, Éq. (4.9) s'écrit :

$$\mathbf{L}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}_2^d) = -\mathbf{L}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}_1), \quad (4.12)$$

où le membre de droite est un champ de vecteur qui peut être interprété comme *un terme source vectoriel connu* $-\mathbf{S}_1(x, y, z)$ dont le support est borné dans la région des sillons par l'élément diffractif. Pour s'en convaincre, on introduit le terme nul défini en Éq. (4.10) et la linéarité de \mathbf{L} (induite par celle du rotationnel) conduit à :

$$\mathbf{S}_1 := \mathbf{L}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}_1) = \mathbf{L}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}_1) - \underbrace{\mathbf{L}_{\varepsilon_1, \mu_1}(\mathbf{E}_1)}_{=0} = \mathbf{L}_{\varepsilon - \varepsilon_1, \mu - \mu_1}(\mathbf{E}_1). \quad (4.13)$$

1.3 Quasi-périodicité et formulation faible

La formulation faible est construite en multipliant scalairement l'Éq. 4.9 par des vecteurs de poids \mathbf{E}' choisis dans l'ensemble des fonctions quasi-bi-périodiques de $L^2(\text{rot})$ (noté $L^2(\text{rot}, (d_x, d_y), \mathbf{k})$) dans Ω :

$$\mathbf{R}_{\varepsilon, \mu} = \int_{\Omega} -\text{rot}(\mu_r^{-1} \text{rot} \mathbf{E}) \cdot \overline{\mathbf{E}'} + k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}'} d\Omega \quad (4.14)$$

En intégrant par partie Éq. 4.14 et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on obtient :

$$\mathbf{R}_{\varepsilon, \mu} = \int_{\Omega} -\mu_r^{-1} \text{rot} \mathbf{E} \cdot \text{rot} \overline{\mathbf{E}'} + k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}'} d\Omega - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{n} \times (\mu_r^{-1} \text{rot} \mathbf{E})) \cdot \overline{\mathbf{E}'} dS \quad (4.15)$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire de la normale extérieure à la surface.

La solution \mathbf{E}_2^d de la *formulation faible associée au problème de diffraction*, exprimé sous une *forme radiative équivalente* en Éq. 4.12, est l'élément de $L^2(\text{rot}, (d_x, d_y), \mathbf{k})$

tel que :

$$\forall \mathbf{E}' \in L^2(\text{rot}, d_x, d_y, \mathbf{k}), \quad \begin{cases} \forall (x, y, z) \in \Omega_s, & \mathbf{R}_{\varepsilon_g, \mu_g}(\mathbf{E}_2^d, \mathbf{E}') = -\mathbf{R}_{\varepsilon_g, \mu_g}(\mathbf{S}_1, \mathbf{E}') \\ \forall (x, y, z) \in \Omega \setminus \Omega_s, & \mathbf{R}_{\varepsilon, \mu}(\mathbf{E}_2^d, \mathbf{E}') = 0 \end{cases} \quad (4.16)$$

On peut se reporter à la partie 1.8 du chapitre 2 pour la synthèse détaillée de la méthode.

Enfin, comme dans le cas scalaire, des conditions de quasi-périodicité sont imposées selon Ox et selon Oy grâce au terme de bord. Les PML tri-dimensionnelles adaptées au substrat et superstrat sont calculées selon les mêmes principes qu'en partie 1.5, chapitre 2. Enfin, les conditions de Neumann homogènes sont appliquées sur leur frontière extérieure orthogonale à Oz respective.

1.4 Éléments d'arêtes (ou de Whitney) d'ordre 2

1.4.1 Généralités, notations et définitions

L'emploi d'éléments finis nodaux conduirait à imposer la continuité de toutes les composantes du champ au passage d'un élément à un autre. Ceci n'est pas représentatif du cas général, puisque la composante normale du champ \mathbf{E} est discontinue à la traversée d'une interface entre deux matériaux de propriétés optiques différentes. Par exemple, l'utilisation d'éléments finis nodaux dans les problèmes aux valeurs propres de guide d'onde entraîne la présence de modes parasites dans la solution finale (voir [113]).

Dans le cas vectoriel, on a recours à des éléments finis particuliers, les éléments d'arête (ou formes de Whitney, adaptées par Bossavit [114]). Ces éléments conviennent à la représentation des champs de vecteurs comme \mathbf{E} , en autorisant la discontinuité de leur composante normale, tout en imposant la continuité de leurs composantes tangentielles. Au lieu d'associer les DDL du système algébrique final aux *nœuds* du maillage m (comme les *éléments nodaux*, cf. partie 1.7, chapitre 2), les éléments d'arête (resp. de *face*) interprètent les DDL comme les *circulations* (resp. *flux*) des champs de vecteurs à approximer le long (resp. à travers) des *arêtes* (resp. les *faces*) du maillage (voir le Tableau 4, colonne DDL).

Considérons la cellule de calcul Ω et sa surface extérieure $\partial\Omega$. Ce volume est décomposé en un nombre fini de tétraèdres en respectant cette règle : deux tétraèdres

du maillage ont en commun soit une face, soit une arête, soit un nœud, ou n'ont aucun contact. On appelle \mathcal{T} l'ensemble des tétraèdres, \mathcal{F} l'ensemble des faces, \mathcal{A} l'ensemble des arêtes et \mathcal{N} l'ensemble des nœuds. Par la suite, il sera fait référence au nœud $n = \{i\}$, à l'arête $a = \{i, j\}$, à la face $f = \{i, j, k\}$ ou au tétraèdre $t = \{i, j, k, l\}$, c'est-à-dire aux p -simplexes ($p = 0$ pour un nœud, $p = 1$ pour une arête, $p = 2$ pour une face, $p = 3$ pour un tétraèdre) définis par le maillage de Ω . On associe aux ensembles \mathcal{N} , \mathcal{A} , \mathcal{F} ou \mathcal{T} quatre espaces de vecteurs W^p constituant des bases.

Avant de décrire les vecteurs de base associés au maillage, il faut définir les *coordonnées barycentriques*. Si i est un nœud, la restriction sur Ω de la fonction coordonnée barycentrique λ_i vaut 1 au nœud i et 0 sur tous les autres tétraèdres ne contenant pas i dans l'ensemble de leurs sommets. Si M est un point de $t = \{i, j, k, l\}$, $\lambda_i(M)$ désigne le poids du nœuds i dans la combinaison linéaire définissant la position de M à partir de celle des sommets de t .

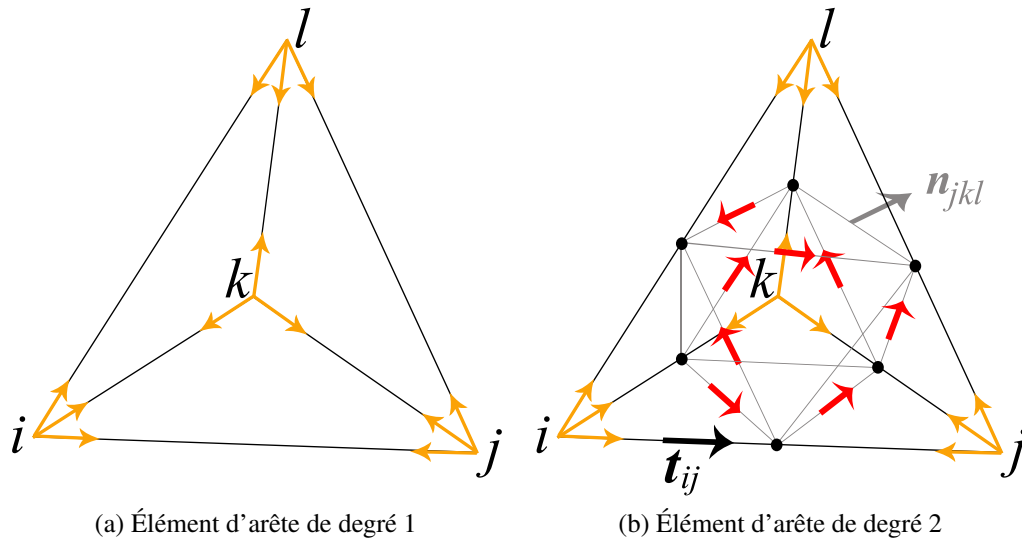


Figure 47: Éléments d'arête de degrés 1 et 2 et leurs vecteurs de base associés

1.4.2 Vecteurs de base

Dans le cas général, les bases W^p associées aux éléments de Whitney de type $p = \{0, 1, 2, 3\}$ sont générées à partir des vecteurs suivants [116] :

p	p -simplex	Vecteurs de base	DDL	Continuité	Exemple
0	$n = \{i\}$	scalaire w_i	valeur du champ en n	toutes les composantes	
1	$a = \{i, j\}$	vecteur \mathbf{w}_a	circulation du champ le long de a	composantes tangentielles	E, H
2	$f = \{i, j, k\}$	vecteur \mathbf{w}_f	flux du champ à travers f	composantes normales	D, B
3	$t = \{i, j, k, l\}$	scalaire w_t	intégrale volumique du champ sur t	aucune	charge ρ

Tableau 4: p -formes (ou éléments) de Whitney (cf. [115])

- pour $p = 0$, on a une fonction par nœud, $w_i = \lambda_i$, la fonction scalaire coordonnée barycentrique. On se ramène alors dans le cas de l'élément fini nodal décrit en partie 1.7, chapitre 2.
- pour $p = 1$ (cf. Figure 47a), on définit pour chaque arête $a = \{i, j\}$ un vecteur $\mathbf{w}_a = \lambda_i \text{grad } \lambda_j - \lambda_j \text{grad } \lambda_i$ engendrant l'espace W^1 . Les \mathbf{w}_a sont dits *rot-conformes*. Ils appartiennent à $L^2(\text{rot})$.
- pour $p = 2$ (cf. Figure 47b), on définit pour chaque face $f = \{i, j, k\}$ un champ de vecteur $\mathbf{w}_f = 2 (\lambda_i \text{grad } \lambda_j \times \text{grad } \lambda_k + \lambda_j \text{grad } \lambda_k \times \text{grad } \lambda_i + \lambda_k \text{grad } \lambda_i \times \text{grad } \lambda_j)$. Les \mathbf{w}_f sont dits *div-conformes*. Ils appartiennent à $L^2(\text{div})$.

1.4.3 Degrés de liberté et expression de l'approximation de la solution

Dans le cas d'éléments de Whitney d'ordre 2, ou plus, les DDL ne sont pas associés aux arêtes des tétraèdres seulement. À ce titre, ils sont appelés *éléments mixtes d'ordre 2* (ou *quadratiques*).

Douze DDL (deux pour chacune des six arêtes) sont définis à partir de l'intégrale linéique de la projection de \mathbf{E}_2^d (qui est une 1-forme) sur $a = \{i, j\}$:

$$\begin{cases} \vartheta_{ij} = \int_i^j \mathbf{E}_2^d \cdot \mathbf{t}_{ij} \lambda_i dl \\ \vartheta_{ji} = \int_j^i \mathbf{E}_2^d \cdot \mathbf{t}_{ji} \lambda_j dl \end{cases} \quad (4.17)$$

Le problème rencontré lors du choix des DDL supplémentaires est que ceux-ci doivent être indépendants des précédents, et entre eux. L'approche classique (voir [117] pour les détails du calcul) consiste à exprimer $\text{rot} \mathbf{E}_2^d$, qui est une 2-forme dont la composante normale est continue, en fonction des DDL précédents. Il apparaît alors qu'un choix judicieux pour les DDL de chaque face $f = \{i, j, k\}$ sont les deux intégrales surfaciques suivantes :

$$\begin{cases} \vartheta_{ijk} = \int_{ikj} \left(\mathbf{E}_2^d \times \mathbf{n}_{ijk}^+ \right) \cdot \text{grad} \lambda_j \, dS \\ \vartheta_{ikj} = \int_{ikj} \left(\mathbf{E}_2^d \times \mathbf{n}_{ijk}^- \right) \cdot \text{grad} \lambda_k \, dS \end{cases} \quad (4.18)$$

À partir des vecteurs de base et des DDL ainsi définis, l'approximation de \mathbf{E}_2^d sur un maillage tétraédrique m s'écrit dans Ω :

$$\mathbf{E}_2^{d,m} = \sum_{a \in \mathcal{A}} \vartheta_a \mathbf{w}_a + \sum_{f \in \mathcal{F}} \vartheta_f \mathbf{w}_f \quad (4.19)$$

Les vecteurs de test \mathbf{E}' (cf. Éq. 4.16, partie 1.3) sont choisis dans le même espace que la solution \mathbf{E}_2^d , $L^2(\text{rot}, (d_x, d_y), \mathbf{k})$. D'après la formulation de Galerkin, ce choix est fait de telle sorte que leur restriction à une bi-période appartienne à l'ensemble des vecteurs de base définis en partie 1.4.2. En introduisant la décomposition du champ de l'Éq. 4.19 dans l'Éq. 4.16, on aboutit au système algébrique final qui est résolu, dans les applications numériques qui suivent, grâce à des solveurs directs.

2 Considérations énergétiques

2.1 Efficacités de diffraction

Contrairement aux méthodes basées sur la détermination des coefficients de Rayleigh du champ diffracté comme la méthode différentielle, la FEM permet d'obtenir directement les composantes complexes de \mathbf{E}^d défini en Éq. 4.9 en tout point du volume de calcul. Cette partie détaille le calcul des efficacités de diffraction à partir des composantes transverses de ce champ.

En tant que différence entre deux fonctions quasi-périodiques selon Ox et Oy (voir Éq. 4.9), \mathbf{E}^d est quasi-périodique et ses composantes sont décomposables en série de

Rayleigh. Ceci est valable dans tout l'espace de calcul, région des sillons comprise :

$$E_x^d(x, y, z) = \sum_{(n,m) \in \mathbb{Z}^2} u_{n,m}^{d,x}(z) e^{-i(\alpha_n x + \beta_m y)} \quad (4.20)$$

avec $\alpha_n = \alpha_0 + \frac{2\pi}{d_x} n$, $\beta_m = \beta_0 + \frac{2\pi}{d_y} m$ et

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = \frac{1}{d_x d_y} \int_{-d_x/2}^{d_x/2} \int_{-d_y/2}^{d_y/2} E_x^d(x, y, z) e^{-i(\alpha_n x + \beta_m y)} dx dy \quad (4.21)$$

En introduisant cette décomposition dans l'équation de Helmholtz vérifiée par E_x^d partout sauf dans la région des sillons, on peut exprimer ces coefficients de Rayleigh dans le substrat et le superstrat :

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = e_{n,m}^{x,p} e^{-i\gamma_{n,m}^+ z} + e_{n,m}^{x,c} e^{i\gamma_{n,m}^+ z} \quad (4.22)$$

avec $\gamma_{n,m}^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^2 - \beta_m^2$, avec $\gamma_{n,m}$ (ou $-i\gamma_{n,m}$) positif. $u_{n,m}^{d,x}$ correspond donc à la somme d'une onde plane propagative (se propageant vers dans le sens des z décroissants, exposant p) et d'une onde plane contra-propagative (exposant c). Les COS du champ diffracté \mathbf{E}^d imposent :

$$\forall (n, m) \in \mathbb{Z}^2 \begin{cases} e_{n,m}^{x,p} = 0 & \text{pour } z > z_0 \\ e_{n,m}^{x,c} = 0 & \text{pour } z < z_N \end{cases} \quad (4.23)$$

Comme dans le cas scalaire (cf. 2.1, chapitre 2), Éq. 4.21 permet donc de déterminer les $e_{n,m}^{x,c}$ (resp. $e_{n,m}^{x,p}$) par double intégration numérique (méthode des trapèzes) d'une coupe de champ à une altitude z_c fixée dans le superstrat (resp. substrat). Les composantes E_y^d et E_z^d s'écrivent et les coefficients $e_{n,m}^{y,\{c,p\}}$ et $e_{n,m}^{z,\{c,p\}}$ s'obtiennent numériquement exactement de la même manière.

On en déduit les efficacités de diffraction transmises et réfléchies définies par :

$$\begin{cases} R_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^+}{\gamma_0} \mathbf{e}_{n,m}^c(z_c) \cdot \overline{\mathbf{e}_{n,m}^c(z_c)} & \text{pour } z_c > z_0 \\ T_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^-}{\gamma_0} \mathbf{e}_{n,m}^p(z_c) \cdot \overline{\mathbf{e}_{n,m}^p(z_c)} & \text{pour } z_c < z_N \end{cases} \quad (4.24)$$

avec $\mathbf{e}_{n,m}^{\{c,p\}} = e_{n,m}^{x,\{c,p\}} \mathbf{x} + e_{n,m}^{y,\{c,p\}} \mathbf{y} + e_{n,m}^{z,\{c,p\}} \mathbf{z}$.

2.2 Calcul des pertes dues à l'effet Joule

Considérons un diélectrique à pertes caractérisé par sa permittivité complexe $\varepsilon_r = \varepsilon' + \varepsilon'' i$, sa perméabilité complexe $\mu_r = \mu' + \mu'' i$ et le vecteur unitaire \mathbf{n} de la normale extérieure à sa surface fermée S délimitant son volume Ω . En régime sinusoïdal, le champ cède par période T à la matière une énergie W que l'on peut calculer grâce au Théorème de Poynting complexe dont la formulation découle directement des équations de Maxwell en régime harmonique (voir par exemple [118]) :

$$\frac{W}{T} = \Re e \left(\int_S -\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_{\text{moy}} dS \right) = -\Re e \left(\int_{\Omega} \text{div} \mathbf{S}_{\text{moy}} d\Omega \right)$$

où $\mathbf{S}_{\text{moy}} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \overline{\mathbf{H}}$. Notons que la continuité de $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_{\text{moy}}$ est assurée par celle des composantes tangentielles des champs \mathbf{E} et \mathbf{H} lors de la traversée de S .

Dans le cas isotrope, en l'absence de courant, tenant compte de l'égalité $\text{div}(\mathbf{E} \times \overline{\mathbf{H}}) = -\mathbf{E} \cdot \text{rot} \overline{\mathbf{H}} + \overline{\mathbf{H}} \cdot \text{rot} \mathbf{E}$ et des équations de Maxwell définies en Éq. (2.3a) et Éq. (2.3b), on a :

$$\frac{W}{T} = \Re e \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} i \omega (\varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}} + \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \cdot \overline{\mathbf{H}}) d\Omega \right)$$

Ainsi, on obtient les pertes par effet Joule Q dans le matériau à pertes (pour tous les matériaux utilisés ici, $\mu_r = 1$) en calculant directement :

$$Q = \frac{W}{T} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \omega \varepsilon'' \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}}$$

Les volumes et normales aux surfaces étant complètement définis lors de la mise en œuvre de la FEM, cette quantité est calculée rapidement, une fois \mathbf{E} connu en tout point de la structure. Connaissant les efficacités des ordres de diffraction propagatifs notés (n, m) , il est donc possible d'effectuer un bilan d'énergie complet pour chaque structure en vérifiant :

$$\sum_{n,m} R_{n,m} + \sum_{n,m} T_{n,m} + Q = 1$$

Deux illustrations numériques sont présentées en 3.1.4 et 3.1.5 de ce chapitre.

3 Validation numérique et convergence du calcul

3.1 Cas classiquement traités

Il n'existe que très peu de références dans la littérature exposant des cas numériques. Dans tous les cas traités, le problème n'est constitué que de trois régions (le superstrat, les sillons et le substrat) comme résumé sur la Figure 48. Pour les quatre cas

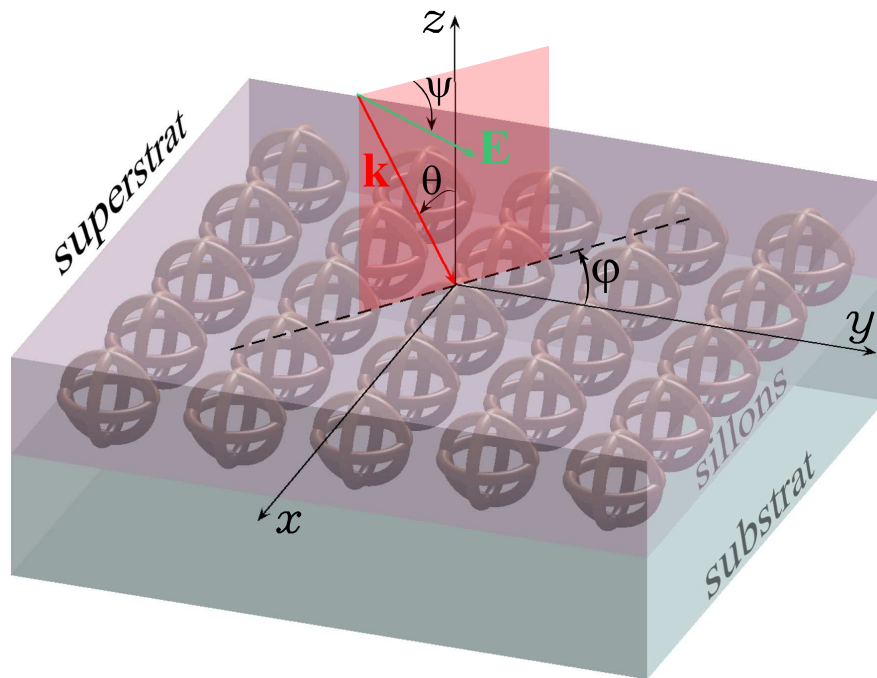


Figure 48: Configuration des cas de validation étudiés

choisis parmi les six configurations trouvées dans la littérature, nous comparons les résultats obtenus par les auteurs respectifs à ceux calculés grâce à notre formulation de la FEM. En utilisant notre méthode, un bilan d'énergie est établi dans chacun des cas (parties 3.1.1 à 3.1.4). Sur le même modèle, il est ensuite proposé un cas de géométrie peu classique, un tore, à pertes, sur substrat de verre (partie 3.1.5). La convergence du calcul fait l'objet de la partie 3.2.1.

3.1.1 Réseau pavé ou en damier

Paramètre	Valeur
λ_0	-
φ_0	0°
θ_0	0°
ψ_0	45°
d_x	$\frac{5\sqrt{2}}{4}\lambda_0$
d_y	$\frac{5\sqrt{2}}{4}\lambda_0$
h	λ_0
ε^+	2.25
ε^-	1
ε^g	2.25

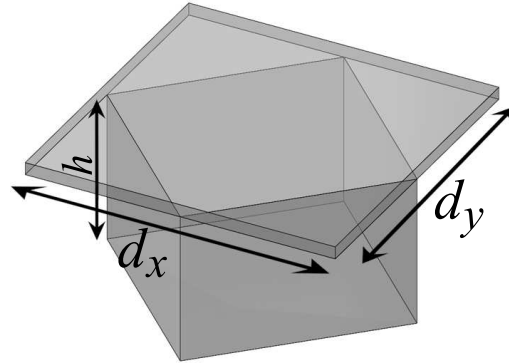


Figure 49: Éléments diffractifs à "bords verticaux"

Tableau 5: Paramètres du réseau [61]

	[61]	FEM
$T_{-1,-1}$	0.04308	0.04333
$T_{-1,0}$	0.12860	0.12845
$T_{-1,+1}$	0.06196	0.06176
$T_{0,-1}$	0.12860	0.12838
$T_{0,0}$	0.17486	0.17577
$T_{0,+1}$	0.12860	0.12839
$T_{+1,-1}$	0.06196	0.06177
$T_{+1,0}$	0.12860	0.12843
$T_{+1,+1}$	0.04308	0.04332
$\sum_{n=-2}^{+2} \sum_{m=-2}^{+2} R_{n,m}$	-	0.10040
TOTAL	-	1.00000

Tableau 6: Bilan d'énergie [61]

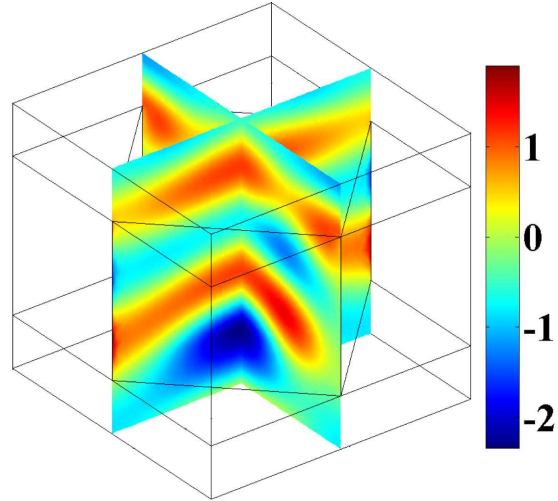


Figure 50: $\Re(E_x)$ en V/m

La FEM donne des résultats en bon accord avec ceux de L. Li ([61], 1997) puisque l'écart relatif maximal entre les deux séries de valeur reste inférieur à 10^{-3} . De plus, la somme des efficacités des ordres propagatifs donnés par la FEM est très proche de 1, malgré le cumul des erreurs sur les efficacités.

3.1.2 Réseau pyramidal

Paramètre	Valeur
λ_0	1.533
φ_0	45°
θ_0	30°
ψ_0	0°
d_x	1.5
d_y	1
h	0.25
ε^+	1
ε^-	2.25
ε^g	2.25

Tableau 7: Paramètres du réseau

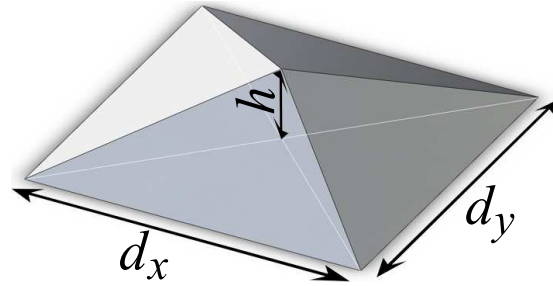
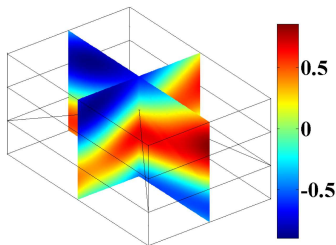


Figure 51: Élément diffractif à "bords obliques"

	[100]	[104]	[119]	[102]	FEM
$R_{-1,0}$	0.00254	0.00207	0.00246	0.00249	0.00251
$R_{0,0}$	0.01984	0.01928	0.01951	0.01963	0.01938
$T_{-1,-1}$	0.00092	0.00081	0.00086	0.00086	0.00087
$T_{0,-1}$	0.00704	0.00767	0.00679	0.00677	0.00692
$T_{-1,0}$	0.00303	0.00370	0.00294	0.00294	0.00299
$T_{0,0}$	0.96219	0.96316	0.96472	0.96448	0.96447
$T_{1,0}$	0.00299	0.00332	0.00280	0.00282	0.00290
TOTAL	0.99855	1.00001	1.00008	0.99999	1.00004

Tableau 8: Comparaison avec les efficacités données par [100, 104, 119, 102]

Figure 52: $\Re(E_y)$ (V/m)

Les résultats de la FEM sont en bon accord avec ceux de la méthode C [100, 102], de la méthode de Rayleigh [104] et de la RCWA [119]. Les bords de l'élément diffractif sont, cette fois, obliques.

3.1.3 Réseau bi-sinusoïdal

La surface du réseau bi-sinusoïdal est décrite par la fonction f définie par :

$$f(x,y) = \frac{h}{4} \left[\cos\left(\frac{2\pi x}{d}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{d}\right) \right] \quad (4.25)$$

Paramètre	Valeur
λ_0	0.83
φ_0	0°
θ_0	0°
ψ_0	0°
d_x	1
d_y	1
h	0.2 (cf. Éq. (4.25))
ε^+	1
ε^-	4
ε^g	4

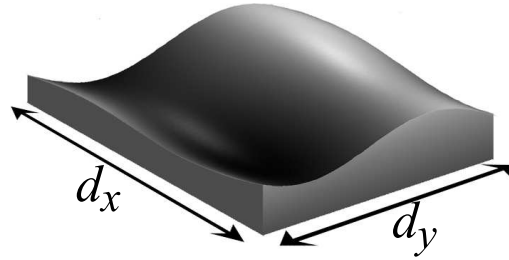


Tableau 9: Configuration du réseau[105]

Figure 53: Élément diffractif

	[105]	FEM
$R_{-1,0}$	0.01044	0.01164
$R_{0,-1}$	0.01183	0.01165
$T_{-1,-1}$	0.06175	0.06299
$\sum_{n=-2}^{+2} \sum_{m=-2}^{+2} \Re e(R_{n,m})$	-	0.10685
$\sum_{n=-2}^{+2} \sum_{m=-2}^{+2} \Re e(T_{n,m})$	-	0.89121
TOTAL	-	0.99806

Tableau 10: Bilan d'énergie [105]

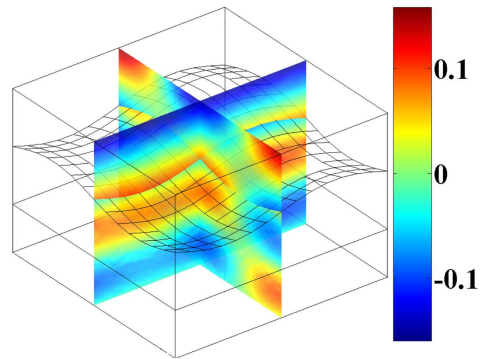


Figure 54: $\Re e(E_z)$ en V/m

La bi-sinusoïde a été échantillonnée (20×20 points), puis convertie dans un format de fichier de surface 3D pour définir la géométrie du modèle. Cela peut expliquer les légères différences avec les résultats obtenus par la méthode de variation de frontières de Bruno *et al.* [105] (1993).

3.1.4 Réseau de trous circulaires dans une couche à pertes

Paramètre	Valeur
λ_0	500 nm
φ_0	0°
θ_0	0°
ψ_0	45°
$d_x = d_y$	$1 \mu\text{m}$
$a = h$	500 nm
ε^+	1
ε^-	2.25
ε^g	$0.8125 + 5.2500i$

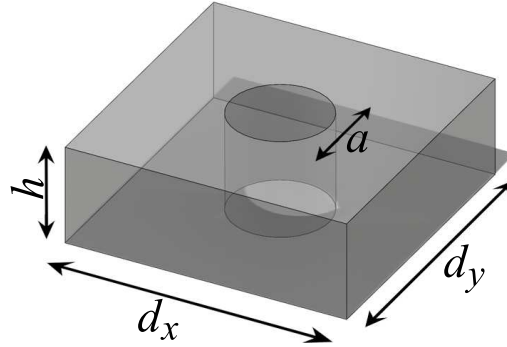
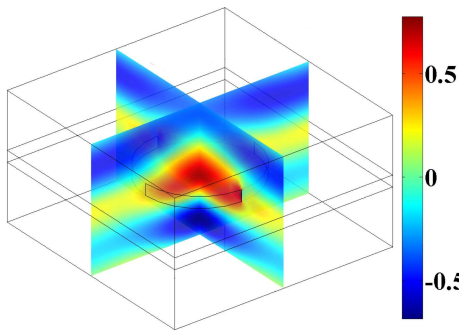


Tableau 11: Paramètres du réseau[96]

Figure 55: Éléments diffractifs

	[94]	[61]	[96, 120]	FEM
$R_{0,0}$	0.24657	0.24339	0.24420	0.24415
$\sum_{n=-2}^{+2} \sum_{m=-2}^{+2} T_{n,m}$	—	—	—	0.29110
$\sum_{n=-1}^{+1} \sum_{m=-1}^{+1} R_{n,m}$	—	—	—	0.26761
Q	—	—	—	0.44148
TOTAL	—	—	—	1.00019

Tableau 12: Comparaison avec [94, 61, 96] et bilan d'énergie

Figure 56: $\Re e(E_y)$ en V/m

Dans ce cas à pertes, les résultats obtenus par la FEM sont en bon accord avec ceux issus de la FMM [61], de la méthode différentielle [96, 120] et de la RCWA [94]. Grâce à notre méthode, les pertes dans l'élément diffractif peuvent être évaluées aisément et un bilan d'énergie complet est proposé pour cette configuration. Enfin, la partie 3.2.1 de ce chapitre fera l'objet d'une étude de convergence sur la valeur $R_{0,0}$.

3.1.5 Réseau de tores à pertes

Paramètre	Valeur
λ_0	1
φ_0	0°
θ_0	0°
ψ_0	0°
$d_x = d_y$	0.3
a	0.1
b	0.05
R	0.15
ε^+	1
ε^-	2.25
ε^g	$-21+20i$

Tableau 13: Configuration du réseau de tores

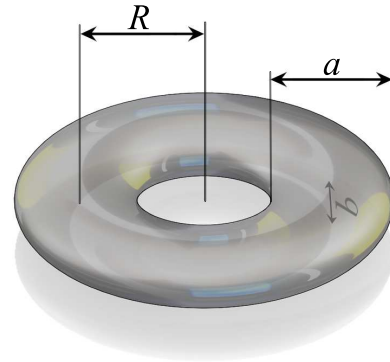


Figure 57: Élément diffractif

	3D FEM
$R_{0,0}$	0.35740
$T_{0,0}$	0.34056
Q	0.30207
TOTAL	1.00003

Tableau 14: Bilan d'énergie

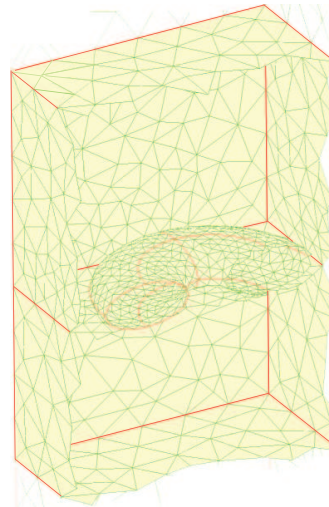


Figure 58: Maillage du tore

Le calcul des efficacités de diffraction de ce bi-réseau montre l'indépendance de notre méthode face à la géométrie de l'élément diffractif. ε^g a été choisi de telle sorte que l'épaisseur de peau soit de l'ordre de grandeur de b , pour maximiser les pertes. On constate (cf. Tableau 14) que le bilan d'énergie reste très bon, malgré ces fortes pertes et la géométrie non triviale de l'élément diffractif.

3.2 Convergence et temps de calcul

3.2.1 Convergence du calcul

Dans les méthodes telles que la RCWA ou la méthode différentielle, basées sur la détermination des coefficients de Rayleigh, on se donne un nombre proportionnel à N_R de coefficients à déterminer *a priori*. Le champ recherché est alors décomposé en série de Fourier, introduit sous cette forme dans les équations de Maxwell, ce qui supprime la dépendance en x et y . On aboutit à un système d'équations différentielles couplées dont il est possible de mettre les coefficients sous une forme matricielle. La matrice ainsi obtenue est, dans certains cas, diagonalisable directement (RCWA), lorsque la géométrie permet d'éliminer la dépendance en z (on ne peut alors traiter que des bords verticaux, ou décomposés en escaliers). Dans d'autres cas, il faut utiliser des méthodes intégrales pour résoudre le système (comme dans le cas de la pyramide par exemple), on parle alors plutôt de méthode différentielle. La carte de champ est reconstruite à partir de ces coefficients. Si la configuration ne suppose que très peu d'ordres propagatifs, et si l'on ne s'intéresse pas au champ dans la région des sillons, cette méthode permet de déterminer rapidement la répartition de l'énergie résultante. En revanche, si on s'intéresse au champ dans la région des sillons, il convient de calculer un certain nombre de coefficients de Rayleigh correspondant à des ordres évanescents et le temps de calcul augmentent en $(N_R)^3$ voire $(N_R)^4$.

La FEM repose sur le calcul direct des composantes vectorielles du champ complexe. Les coefficients de Rayleigh sont déterminés *a posteriori*. Le paramètre limitant la rapidité du calcul est le nombre d'éléments selon lequel le volume de calcul est décomposé. On estime qu'il est nécessaire de calculer au moins deux ou trois points (ou nœuds du maillage) par oscillation du champ, grossièrement λ_0/n , où n est la partie réelle de la racine carré de la permittivité ε du domaine considéré. On s'intéresse alors à la convergence des efficacités de diffraction avec N_M , le nombre d'éléments selon lequel une oscillation du champ dans un milieu d'indice n est échantillonnée. La taille maximale d'une maille élémentaire est pour cela fixée à $\frac{\lambda_0}{N_M n}$. La convergence du calcul est étudiée en augmentant N_M . Il est intéressant de noter que pour des valeurs de N_M inférieures à 3, le calcul FEM donne toujours des résultats pertinents. En effet, $R_{0,0} = 0.2334$ pour $N_M = 1$ et $R_{0,0} = 0.2331$ pour $N_M = 2$. Ce résultat est inhérent à l'utilisation de la FEM. En effet, de par sa formulation sous une forme faible, le calcul

peut être vu comme une minimisation d'énergie. Il est donc cohérent d'aboutir à des grandeurs énergétiques significatives alors que les valeurs locales du champ électrique effectivement calculé sont très grossièrement évaluées, notamment pour $N_M = 1$.

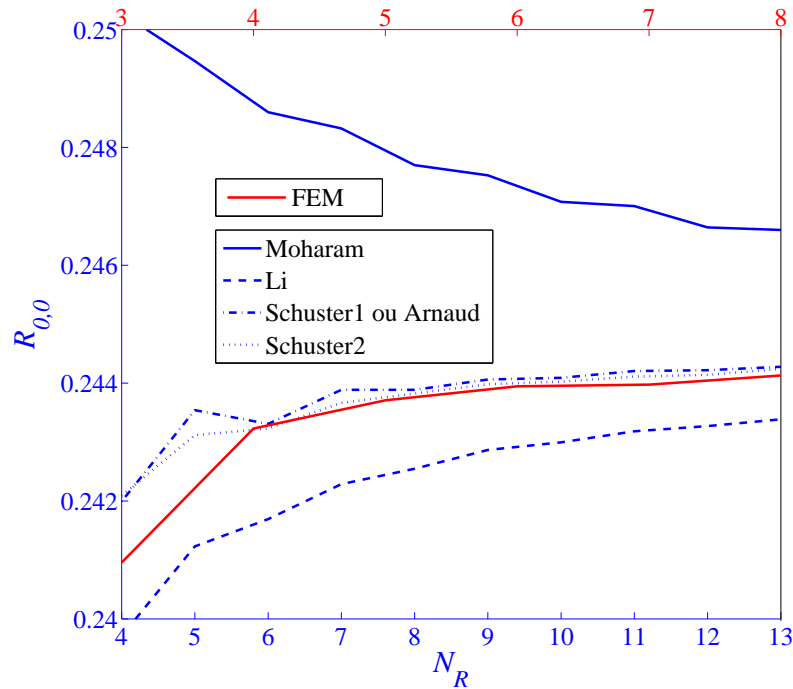


Figure 59: Convergence du calcul 3D

À titre comparatif, il nous a semblé intéressant de superposer (Figure 59) les résultats de convergence de notre calcul avec N_M à ceux établis par Schuster *et al.* [96] (et par L. Arnaud [120]) pour la méthode différentielle en fonction de N_R . L'exemple choisi pour ce calcul est la valeur de $R_{0,0}$ dans la configuration présentée en 3.1.4.

3.2.2 Temps de calcul

Tous les calculs présentés en 3D ont été effectués sur une machine munie de 8 processeurs Itanium1 dual core et de 256Go de mémoire RAM. Les éléments sont des éléments vectoriels d'ordre 2 et le solveur utilisé est PARDISO (solveur direct). Parmi les solveurs directs (UMFPACK, SPOOLES et PARDISO), ce dernier s'est avéré le plus efficace, comme le montre le Tableau 15.

On présente en Figure 60 le temps de calcul (à gauche en ordonnée) nécessaire à la résolution des degrés de liberté du système dont le nombre total est indiqué en

Solveur	Temps de calcul pour 41720 DDL	Temps de calcul pour 205198 DDL
SPOOLES	15 mn 32 s	14 h 44 mn
UMFPACK	2 mn 07 s	1 h 12 mn
PARDISO	57 s	16 mn

Tableau 15: Temps de calcul selon le solveur direct choisi

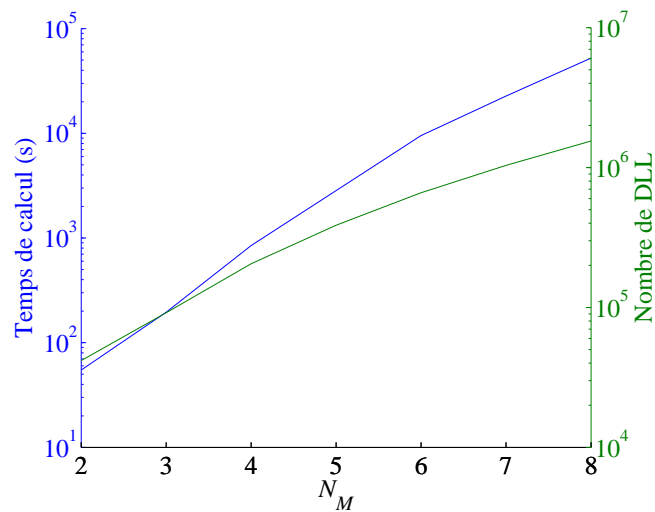


Figure 60: Temps de calcul en fonction de N_M

ordonnée à droite. Notons enfin que pour les valeurs de N_M inférieures ou égales à trois, le problème de diffraction par une ouverture circulaire dans une couche à pertes peut être résolu par un ordinateur portable muni de 4Go de mémoire vive en moins de cinq minutes avec trois chiffres significatifs sur les efficacités de diffraction, précision grandement acceptable dans de nombreux cas expérimentaux.

Conclusion partielle

Nous avons établi une nouvelle méthode vectorielle permettant de calculer de façon rigoureuse les efficacités de diffraction d'un réseau bi-dimensionnel quelconque, éclairé par une onde plane d'incidence et de polarisation arbitraires. Elle repose entièrement

sur l'utilisation d'éléments finis de Whitney d'ordre 2. Comme dans le cas scalaire, le nombre d'éléments diffractifs par bi-période, et de couches dans lesquelles ils sont imbriqués sont arbitraires. Cette méthode est également indépendante de la géométrie des motifs considérés. Elle présente l'avantage d'être très flexible et n'a nécessité aucun ajustement particulier pour retrouver, avec précision (trois à quatre chiffres significatifs sur les efficacités), les quelques exemples numériques existant dans la littérature et établis par des méthodes indépendantes. À ce titre, elle paraît bien adaptée à la richesse géométrique et matérielle du pixel CMOS et des structures diffractives complexes que nous envisageons d'y embarquer. Ce chapitre a fait l'objet d'une publication [121]. Dans le chapitre suivant, nous exploitons ce modèle pour explorer les pistes bibliographiques récentes (détaillées à la fin du chapitre 1) portant sur le filtrage diffractif par des réseaux métalliques sub-longueur d'onde.

Chapitre 5

Application à la conception de réseaux croisés embarqués dans un pixel CMOS

Dans ce chapitre, une recherche de paramètres opto-géométriques (optimaux pour le filtrage RVB) de bi-réseaux métalliques a été menée, sur substrat de verre. Il en ressort un jeu de structures, de paramètres et de matériaux permettant de concevoir un triplet de filtres. Après avoir vérifié que ce triplet permet d'obtenir des performances colorimétriques satisfaisantes, nous décrivons la mise au point d'un processus expérimental complet de fabrication et de caractérisation de pixels munis de structures diffractives de ce type.

1 Réseaux croisés métalliques sur substrat de silice

1.1 Candidats retenus pour le filtrage RGB

Dans cette partie, la recherche bibliographique effectuée à la fin du chapitre 1 sert de base pour choisir le motif diffractif le plus adapté à la problématique posée, ainsi que la géométrie et le matériau le constituant. Reprenons par exemple le cas, évoqué par Genet *et al.* [52], des ouvertures circulaires de diamètre a et de période d dans un film d'argent de $h = 300$ nm d'épaisseur en "suspension" dans l'air. Les niveaux de transmission sont, dans cet article, donnés en unités arbitraires. Grâce au code présenté au chapitre 4, il est possible de retrouver précisément ces valeurs, c'est-à-dire $T_{0,0}(\lambda)$, comme en témoigne la Figure 61. Ces profils spectraux en transmission passe-bandes

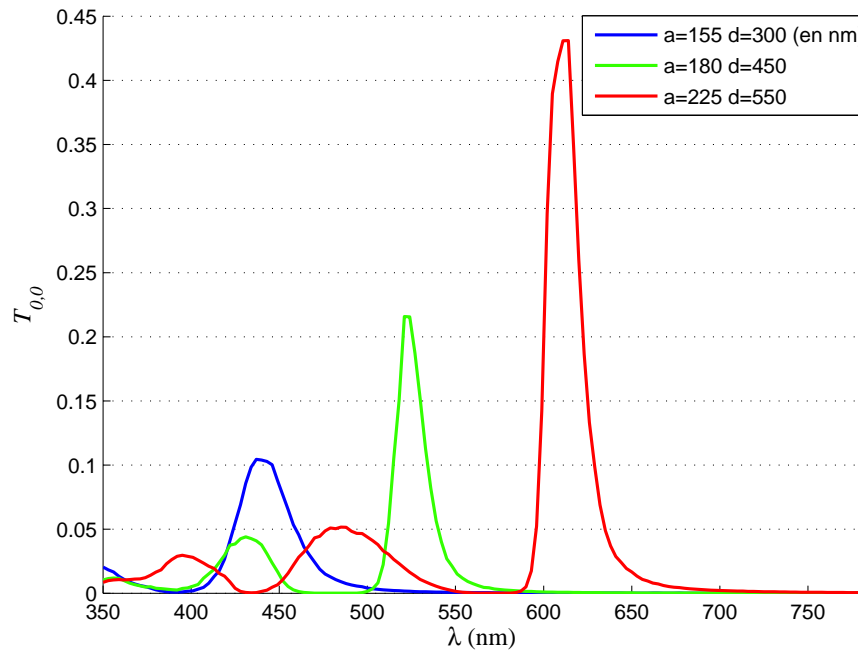


Figure 61: Transmission dans l'ordre 0 des réseaux d'argent mentionnés dans [52]

expliquent les couleurs de la photo de la Figure 26b. Cependant, ces filtres ne sont pas, en l'état, adaptables au filtrage RVB pour les imageurs CMOS. Les maxima obtenus sont trop différents pour chaque couleur (0.104 dans le bleu contre 0.431 dans le rouge), ce qui rendrait la balance des blancs difficile (cf. Éq. 1.1). De plus, les "pieds" des bandes passantes ne se recoupent pas assez haut pour pouvoir effectuer une correction des couleurs efficace (cf. Éq. 1.2). Cet exemple représente toutefois un point de départ intéressant.

Les pistes bibliographiques introduites au chapitre 1, partie 3.2.2, ont fait ressortir trois motifs diffractifs et trois matériaux sur lesquels il convient de mener une étude paramétrique. Pour cela, il a été choisi de placer les réseaux sur du verre, et non sur l'empilement multi-couches, de manière à isoler plus aisément l'influence de chaque paramètre géométrique sur le profil spectral défini (par la fonction $T_{0,0}(\lambda)$) des filtres. De plus, les périodes ont été fixées à $d_x = d_y = 300$ nm, afin de pouvoir placer 7×7 motifs diffractifs dans une section de pixel. On cherchera donc, ici, à accorder ces réseaux en fonction de leur épaisseur ou de la taille des ouvertures pratiquées. Cette étude paramétrique est présentée dans son intégralité en Annexe B (les Figures 75, 76 et 77

sont assez denses, d'où leur renvoi en annexe).

Il ressort notamment de cette étude que les ouvertures annulaires présentent des spectres en transmission accordables en longueur d'onde selon leur épaisseur (voir 62b).

Ceux des réseaux de trous et plots le sont aussi, mais plutôt selon leur période. En effet, pour ces structures, on repère dans chaque spectre une forte chute suivie d'un front montant en transmission autour de $\lambda_c = 450$ nm (voir, par exemple, le cas de l'aluminium Figure 76d pour les plots et la Figure 75b pour les trous). À λ_c , la longueur d'onde effective dans la silice vaut $\lambda_c/1.5 = 300$ nm = d , soit la période du réseau. Dans le substrat, l'ordre 1 est donc *propagatif* pour $\lambda < \lambda_c$, *rasant* à $\lambda = \lambda_c$, et *évanescents* pour $\lambda > \lambda_c$. Ce phénomène résonnant, très connu, a été décrit comme une "anomalie" par Wood en 1902 [122], puis expliqué théoriquement en 1907 [123] et modélisé (récemment, par exemple dans [124]) d'un point de vue électromagnétique. Pour décaler ce point intéressant du spectre, il conviendrait donc de faire varier la période des réseaux. La conception d'un filtre rouge à partir des plots d'aluminium (Figure 76a), donc passe-haut en longueur d'onde, est possible en augmentant d_x et d_y de manière à repousser λ_c vers 500 nm. Cependant, l'efficacité dans l'ordre 1 serait importante pour $\lambda < \lambda_c$, ce qui modifierait sensiblement le profil spectral global en transmission.

Les réseaux d'ouvertures annulaires présentent un degré de liberté supplémentaire, induit par les caractéristiques géométriques de l'îlot central. On constate un décalage du spectre vers les grandes longueurs d'onde lorsque la hauteur du réseau augmente, ce qui suggère une forte dépendance de la transmission à la géométrie du motif, plutôt qu'à sa périodicité. Ce point, encore à l'étude, est crucial au regard de l'application visée : le motif de Bayer impose la conception d'un filtre composé d'un nombre fini de motifs.

Dans ce qui suit, on se concentre sur les profils spectraux en transmission de l'Annexe B les plus prometteurs pour le filtrage colorimétrique RVB.

La Figure 62b (version allégée de la Figure 77b de l'annexe B) montre, notamment, trois spectres correspondant à des ouvertures annulaires pratiquées dans des couches d'aluminium d'épaisseur h , avec $d_x = d_y = 300$ nm, $a_1 = 260$ nm et $a_2 = 160$ nm. Nous avons superposé, en trait plein rouge, un spectre obtenu avec de l'argent, intéressant pour le filtrage de la composante Rouge (voir aussi la Figure 62c). Les profils spectraux

obtenus sont en cours d'optimisation, *via* les paramètres a_1 et a_2 , les hauteurs h étant fixées aux valeurs indiquées en Figure 62b.

1.2 Performances colorimétriques

À partir de ces spectres en transmission, il est possible de savoir si le triplet retenu permet une bonne reconstruction de la vaste palette de couleurs d'une scène photographiée. Pour cela on simule la reconstruction des couleurs d'une mire de Macbeth, largement utilisée en photographie. Il s'agit d'une mire composée de 24 carrés (cf. Figure 63) dont les couleurs *théoriques* ont été fixées par la CIE.

Pour chacun des carrés (i,j) , avec $i \in \{A,B,C,D\}$ et $j \in \{1,2,3,4,5,6\}$, on calcule :

$$\begin{cases} R_{i,j} = \int_{400}^{700} S(\lambda) T_{\text{IR}}(\lambda) r_{i,j}(\lambda) T_{0,0}^{\text{R}}(\lambda) d\lambda \\ V_{i,j} = \int_{400}^{700} S(\lambda) T_{\text{IR}}(\lambda) r_{i,j}(\lambda) T_{0,0}^{\text{V}}(\lambda) d\lambda \\ B_{i,j} = \int_{400}^{700} S(\lambda) T_{\text{IR}}(\lambda) r_{i,j}(\lambda) T_{0,0}^{\text{B}}(\lambda) d\lambda \end{cases} \quad (5.1)$$

où :

- $S(\lambda)$ est le spectre de l'illuminant (pris ici à 3200 K)
- $T_{\text{IR}}(\lambda)$ est la transmission du filtre infra-rouge
- $r_{i,j}(\lambda)$ est le spectre réfléchi par chaque carré coloré (i,j) de la mire (valeurs tabulées données par la CIE).
- $T_{0,0}^{\text{R}}(\lambda)$, $T_{0,0}^{\text{V}}(\lambda)$ et $T_{0,0}^{\text{B}}(\lambda)$ sont les spectres en transmission des filtres diffractifs R, V et B (en trait plein sur la Figure 62b)

En reprenant les notations introduites au chapitre 1 (parties 1.5.2 et 1.5.3), on simule ainsi un triplet de coefficients RVB, $\mathbf{C}_{i,j}^{\text{interp}}$, pour chaque carré coloré (i,j) de la mire. Chaque triplet permet donc de représenter une première image, brute, de la mire de Macbeth vue et interpolée à travers le jeu de filtres diffractifs arrangés selon un motif de Bayer (Figure 64a).

L'unique jeu de coefficients définissant les matrices de *balance des blancs* (voir l'Éq. (1.1)) et de *correction des couleurs* (voir l'Éq. (1.2)) est ensuite calculé en minimisant l'écart entre les valeurs cibles, définies par la CIE, et les données, synthétisées en Éq. (5.1), au sens des moindres carrés dans l'espace RVB.

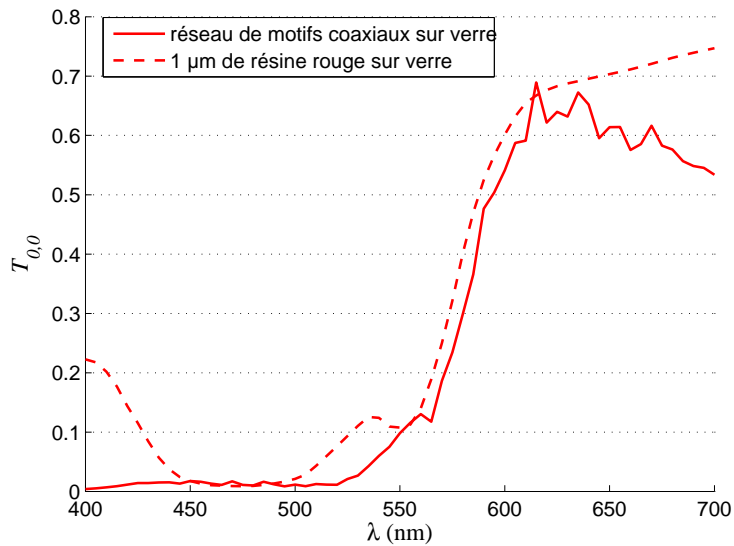
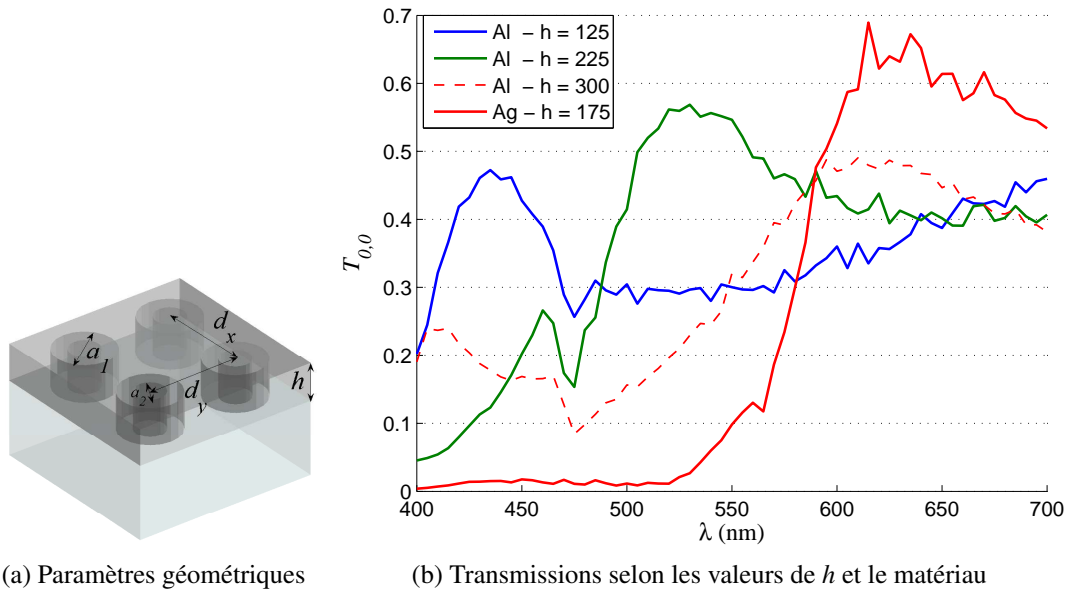


Figure 62: Transmission de réseaux de motifs coaxiaux d'aluminium, avec $d_x = d_y = 300\text{nm}$, $a_1 = 260\text{nm}$, $a_2 = 160\text{nm}$ et h indiqué en légende de 62b. Pour le réseau d'argent (en trait plein rouge sur les Figures 62c et 62b), $d_x = d_y = 300\text{nm}$, $a_1 = 260\text{nm}$, $a_2 = 160\text{nm}$ et $h = 175\text{nm}$

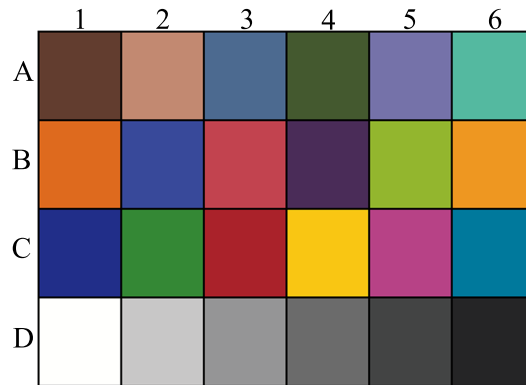


Figure 63: Couleurs réelles (ou *théoriques*) de la mire de Macbeth

$\forall (i, j) \in \{1, 2, 3, 4\} \times \{A, B, C, D\}$,

$$\mathbf{C}_{i,j}^{\text{cor}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.774 & 0.533 & -1.307 \\ -1.425 & 3.115 & -0.689 \\ -1.842 & -5.686 & 8.529 \end{bmatrix}}_{\text{Correction des Couleurs}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1.269 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1.230 \end{bmatrix}}_{\text{Balance des Blancs}} \mathbf{C}_{i,j}^{\text{interp}} \quad (5.2)$$

On peut alors reconstituer (Figure 64b) la mire de Macbeth après interpolation, balance et correction.

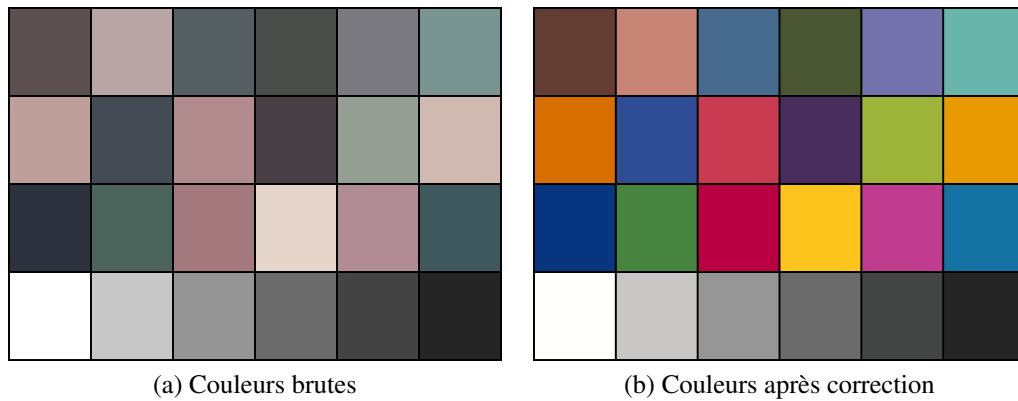


Figure 64: Illustration visuelle de la correction appliquée aux couleurs physiquement filtrées et interpolées

Enfin, pour juger de la performance colorimétrique du triplet diffractif, il faut comparer les différents écarts résiduels aux couleurs de référence entre eux. Pour cela, il

n'est pas judicieux de rester dans l'espace RVB, qui n'est pas un espace chromatique uniforme, en ce sens que deux couleurs visuellement proches peuvent avoir des coefficients RVB plus éloignés que ceux correspondant à deux couleurs évidemment distinctes. Pour représenter les écarts résiduels aux couleurs de référence, il est d'usage de passer dans l'espace uniforme luminance-chrominance $L^*a^*b^*$. Ce système colorimétrique vise à uniformiser la perception des différences de couleurs. Les relations non-linéaires liant L^* , a^* et b^* à R, G et B ont pour but d'imiter la réponse non linéaire de l'œil. On estime qu'un observateur, non entraîné, peut aisément distinguer deux couleurs distantes de plus de 10 unités de chrominance a^*b^* , et ce, quelle que soit la zone considérée du plan de chromaticité. Sur la Figure 65, sont représentées suc-

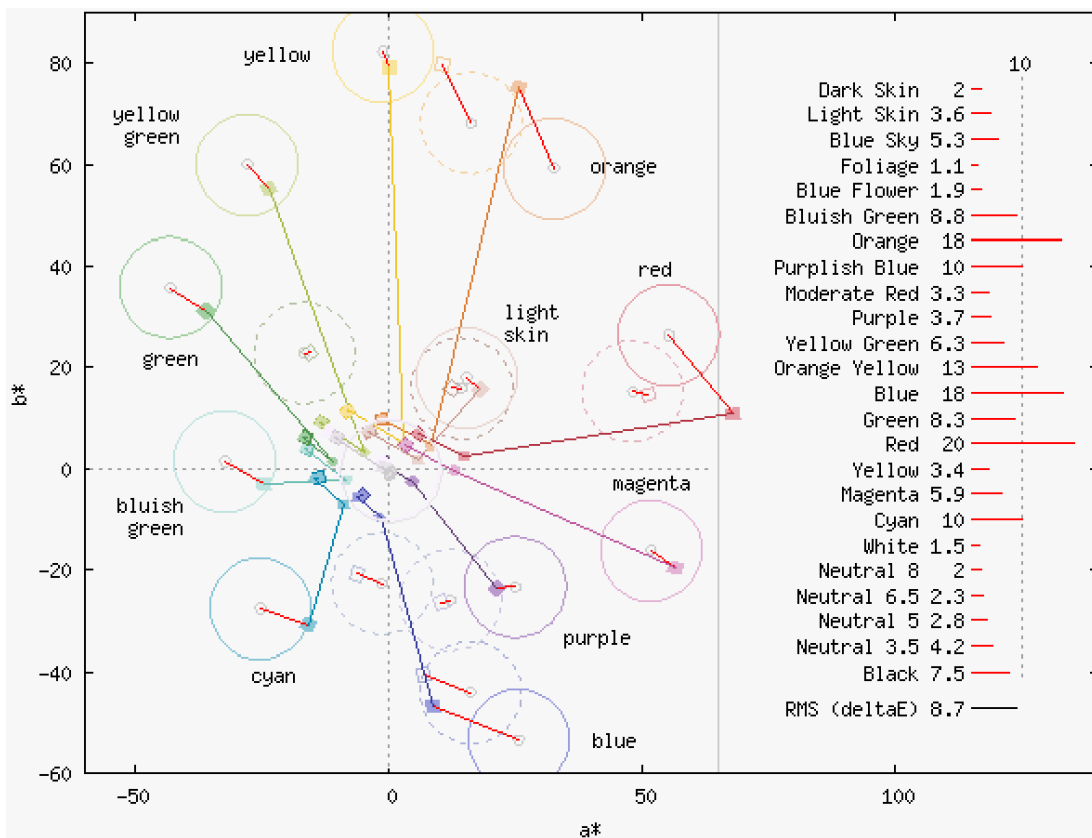


Figure 65: Écarts entre les couleurs reconstruites et "réelles", exprimées dans l'espace CIELAB

cessivement (en suivant les segments de mêmes couleurs), en niveau de chrominance a^*b^* :

- les couleurs interpolées brutes, formant un nuage central
- les couleurs après balance des blancs (premier segment)
- les couleurs après correction (second segment)
- les couleurs de référence, centrées sur un cercle de rayon 10 unités $a*b^*$

À droite de la figure, un diagramme en batons synthétise les écarts, après correction, entre les couleurs de référence et les couleurs reconstruites à partir du jeu de filtres diffractifs. L'erreur la plus élevée est de 20, à comparer visuellement sur le carré C3 de la Figure 66.



Figure 66: Couleurs reconstruites (moitié inférieure de chaque carré) et "réelles" (moitié supérieure)

Le triplet diffractif permet donc, une fois balancé et corrigé, une reconstruction des couleurs, mais pourrait être optimisé. En examinant la dernière ligne de la matrice de correction des couleurs, on remarque (cf. Éq. (5.2)) que la composante Rouge Corrigée s'obtient par $R_{i,j}^{Cor} = -1.842 R_{i,j}^{BB} - \mathbf{5.686} V_{i,j}^{BB} + \mathbf{8.529} B_{i,j}^{BB}$. On peut attribuer ces forts coefficients au fait que la transmission du filtre diffractif Bleu ne "redescend" pas assez au delà de 500 nm (cf. Figure 62b), de même que celle du filtre Vert au delà de 600 nm. Lorsque la scène est à dominante rouge (comme le carré C3, qui est un rouge pur), les filtres diffractifs Bleu et Vert transmettent trop de lumière. Cela génère de forts coefficients B^{interp} et V^{interp} qu'il faut annuler lors de la correction, sans trop modifier R^{interp} , d'où les forts coefficients notés en gras dans l'expression de $R_{i,j}^{Cor}$ ci-dessus. Des investigations sont en cours pour concevoir des filtres Bleu et Vert dotés d'une meilleure réjection dans le rouge. Enfin, lorsque ces filtres auront été adaptés à des

pixels CMOS, il conviendra de déterminer si la reconstruction n'engendre pas trop de bruit [125].

2 Première réalisation sur une matrice pixel standard

2.1 Élaboration des structures pixel

En remarque préliminaire, notons qu'une étape expérimentale peut paraître manquante pour une bonne cohérence de notre démarche. En effet, le modèle vectoriel mis en œuvre au chapitre précédent est adapté aux structures rigoureusement bi-périodiques. Or, le motif bi-périodique d'un capteur CMOS est l'arrangement de Bayer, donc constitué d'un regroupement de quatre pixels de $2.2\mu\text{m}$. Celui-ci représente un volume de calcul conséquent, soit $4.4 \times 4.4 \times 1\mu\text{m}^3$, soit encore, approximativement, $17 \times 17 \times 5\lambda^3$ dans les faibles longueurs d'onde du visible, ce qui correspond à un problème de plusieurs millions de DDL. La résolution de systèmes de cette taille nécessite l'utilisation de préconditionneurs et de solveurs itératifs, GMRES (de l'anglais *Generalized Minimal RESidual*) par exemple, que nous sommes actuellement en train de mettre en œuvre. En revanche, les larges photodiodes utilisées au chapitre 3, munies cette fois de bi-réseaux, sont de taille compatible avec un solveur direct puisque les dimensions transverses de la cellule sont, cette fois, celles du bi-réseau. Nous avons prévu cette étape expérimentale sur large photodiode, avec des bi-réseaux de silicium polycristallin imbriqués dans l'empilement diélectrique. Malheureusement, ces structures faisaient partie du lot perdu déjà mentionné en fin de chapitre 3. Ce chaînon reste manquant pour une validation expérimentale analogue à celle effectuée dans le cas scalaire.

Les structures tests "de type pixel" ont été réalisées selon les étapes schématisées sur la Figure 67. Les micro-lentilles et l'étage couleur d'une matrice de pixels (technologie mûre, IMG220, voir la coupe SEM de la Figure 67a) ont été enlevées par gravure à STMicroelectronics Rousset (cf. Figure 67b). De fines couches métalliques (aluminium, or et argent) ont été déposées, à même la couche de passivation, par évaporation sous vide, au laboratoire IM2NP de Marseille (cf. Figure 67b). En effet, dans un premier temps, il a été décidé de ne pas se limiter aux métaux compatibles avec le procédé de fabrication CMOS, le cuivre et l'aluminium. Enfin, les motifs diffractifs ont été

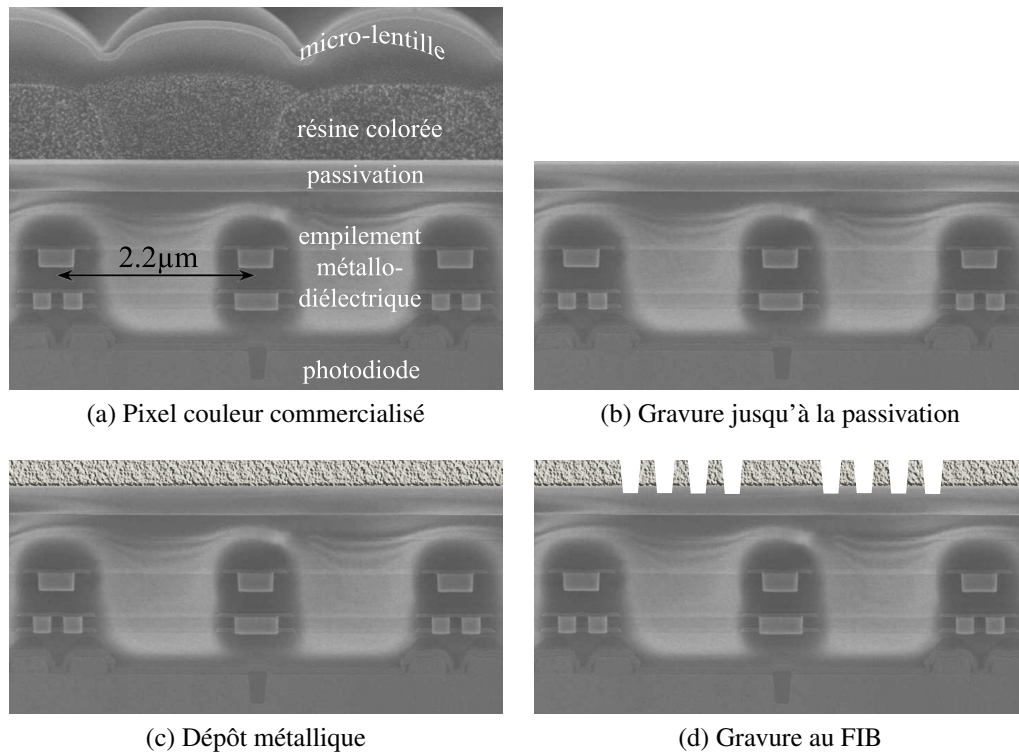


Figure 67: Vue (SEM) en coupe des étapes de fabrication des structures de test "pixel"

gravés au FIB (de l'anglais *Focused Ion Beam*, faisceau d'ions focalisé) à STMicroelectronics Crolles. La Figure 68 illustre la complexité de la manipulation : les motifs sont gravés sur surface équivalente à 4×4 pixels sur une matrice contenant deux millions de pixels.

Ce processus d'élaboration de structures conjugue plusieurs avantages pour l'investigation. En effet, la couche de passivation protège la puce des éventuelles contaminations. Il est donc possible d'y déposer un métal quelconque. De plus, la dernière étape de gravure FIB permet de tester une multitude de motifs, en évitant d'avoir à dessiner un masque de photo-lithographie dédié pour chaque essai. En effet, le FIB utilisé est doté d'un mode autorisant la gravure de motifs dessinés sur une simple image en noir et blanc. Le faisceau d'ions balaye la surface définie par cette image, en ne gravant que les zones noires. Cet outil est donc idéal pour la mise en œuvre expérimentale de nos structures. Enfin, la finesse de gravure FIB est meilleure que celle obtenue en photo-lithographie. Cependant, nous atteignons la limite de résolution du FIB. Il faut

donc graver à très faible puissance, pendant longtemps, en veillant à éviter les dérives mécaniques. C'est pour cette raison que la zone rouge de la Figure 68b a été gravée en quatre étapes successives.

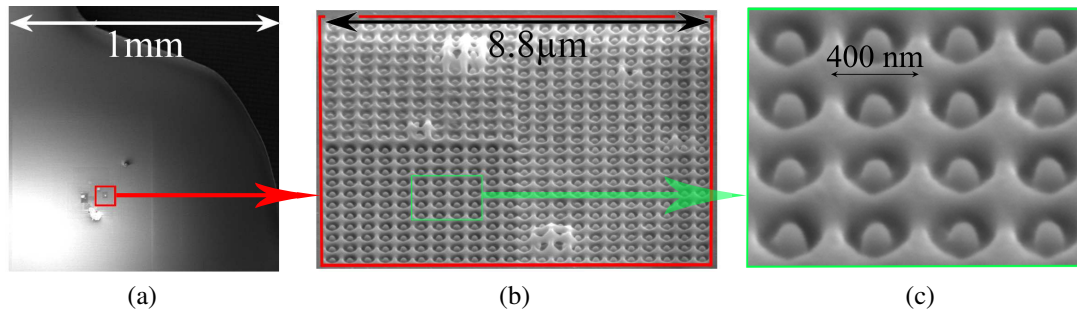


Figure 68: Vue inclinée à 52° des motifs coaxiaux (SEM)

Le principal avantage de ces structures est leur caractérisation, quasi-immédiate, puisqu'elle est effectuée sur le même banc optique de validation, automatisé, que les lots de capteurs destinés à la vente.

2.2 Réponse du pixel diffractif

Les bancs décrits en Annexe C sont dédiés à la caractérisation spectrale des capteurs CMOS.

Sur la puce décrite précédemment, les pixels "noirs et blancs" peuvent être regroupés en trois zones :

- les pixels de référence, non recouverts d'aluminium,
- les pixels recouverts d'aluminium,
- les pixels d'intérêt, recouverts d'aluminium nano-structuré au FIB.

Le banc n°1, permet de travailler en lumière blanche ou en lumière "monochromatique" grâce à un jeu de trois filtres interférentiels à bandes étroites centrées sur 450 (B), 532 (V) et 633 nm (R). Sur ce banc, on détermine le temps d'intégration et les niveaux d'éclairement permettant de travailler dans le régime de fonctionnement linéaire du capteur (loin du point de saturation, et du courant d'obscurité). Typiquement, on ajuste le niveau d'éclairement et le temps d'intégration de sorte que le signal délivré par le pixel soit compris entre 50 et 100 mV, sachant qu'il sature à 800 mV.

Les niveaux électriques obtenus pour les pixels d'intérêt sont très faibles. Il est donc impossible de trouver un point de fonctionnement commun aux pixels d'intérêt et aux pixels de référence : soit les premiers sont noyés dans le courant d'obscurité, soit les seconds saturent. Cependant, la première étape de caractérisation consiste à mesurer une grandeur appelée *Facteur de Conversion* (CVF), intrinsèque au fonctionnement électrique du pixel et déterminé en lumière blanche. Le CVF est le rapport entre le signal de sortie en Volts et le signal de la photodiode en électrons. Mesuré en régime saturé, il perd toute signification. Dans un premier temps, un premier point de fonctionnement P_1 est choisi, approprié aux pixels de référence, pour mesurer le CVF.

Une fois cette valeur établie, on choisit un second point de fonctionnement P_2 , ce qui a pour effet de saturer les pixels de référence, mais de permettre aux pixels d'intérêt de sortir du courant d'obscurité (fort niveau d'éclairement et fort temps d'intégration). On peut alors mesurer les réponses spectrales des pixels d'intérêt aux trois points R, V et B.

Sur le banc n°2, un monochromateur balaye le spectre visible de 380 à 770 nm par incréments de 10 nm et avec une largeur spectrale de 5 nm. Le temps d'intégration et le niveau d'éclairement sont ajustés de manière à se placer au point de fonctionnement P_2 . Les Réponses Spectrales Moyennes (RSM) obtenues pour les quatre types de pixels sont données, en $V/(J/m^2)$ en Figure 69. Le QE (cf. Figure 70) est calculé à partir de la RSM et du facteur de conversion établi sur le banc n°1. Les pixels considérés pour la RSM et le QE sont situés sous la zone gravée au FIB ($8.8 \times 8.8 \mu m^2$, soit l'aire de 4×4 pixels, montrée en Figure 68b). Précisons que les zones de charge d'espace sont différentes d'un pixel à l'autre, selon la couleur qu'ils sont sensés filtrer. Par exemple, celle d'un pixel BLEU est dotée d'une zone implantée empêchant la collection d'électrons générés trop bas dans le silicium, ne pouvant pas correspondre à un photon dans le bleu. C'est pour cette raison qu'il convient de distinguer les réponses des pixels baptisés ROUGE, $VERT_R$, $VERT_B$ et BLEU (même si ceux-ci sont dépourvus de résine colorée, cf. Figures 69 et 70).

Enfin, on peut s'assurer de la cohérence des mesures réalisées entre les deux bancs. Pour cela, il suffit de superposer les RSM déterminées, pour chaque type de pixel, sur le banc n°1 aux points R, V et B fixés par les filtres interférentiels, aux spectres mesurés sur le banc n°2. Sur la Figure 69, on peut constater que les points représentés sur les segments noirs, correspondant à la mesure sur le banc n°1 sont proches des mesures

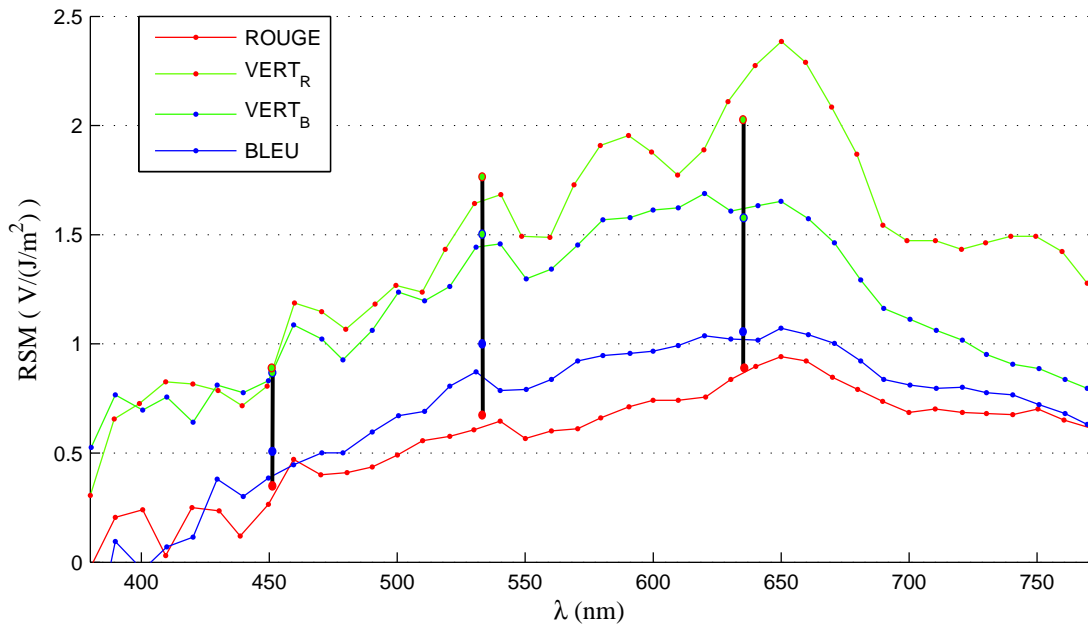


Figure 69: Réponse spectrale "moyenne" mesurée sur le banc n°2. Les mesures aux points R, V et B du banc n°1 sont superposées sur les segments verticaux à 450, 532 et 633 nm

du banc n°2. Ce point valide globalement notre mesure, et ce, malgré les difficultés de choix point de fonctionnement mentionnées plus haut.

Les réponses $VERT_R$ et $VERT_B$, qui correspondent à des pixels de construction semblable, sont plus proches entre elles que des réponses BLEU et ROUGE. Si les implants sont un début d'explication, la réalité relève plus certainement d'une subtile combinaison des phénomènes listés ci-après.

Les niveaux de QE obtenus sont très bas, 100 fois inférieurs aux niveaux requis. Cela peut paraître surprenant, étant donné les bonnes transmissions des filtres diffractifs, calculées en considérant un substrat de silice. Plusieurs éléments permettent d'expliquer les QE mesurés faibles et "plats" :

- le filtre est sur un empilement multi-couches reposant sur un substrat de silicium, et non sur silice comme lors du calcul. La transmission peut s'en trouver complètement modifiée. Un modèle tenant compte de l'empilement est en cours de construction.
- la géométrie des motifs réalisés au FIB présente des bords moins abrupts que

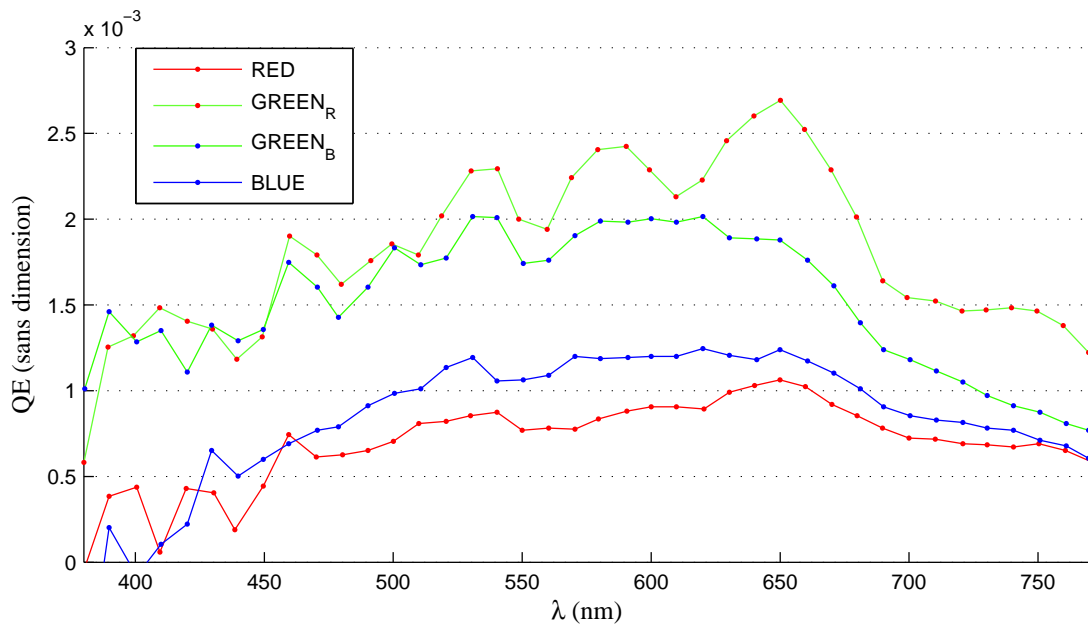


Figure 70: Efficacité Quantique calculées à partir de la RSM mesurée sur le banc n°2 et du CVF mesuré sur le banc n°1

ceux modélisés. Comme on a pu le voir lors de l'étude paramétrique, une faible variation d'un des paramètres géométriques du motif peut avoir une forte influence sur la transmission. Là encore, des simulations sont en cours pour prendre en compte le "lissage" de la géométrie de consigne.

- les motifs sont constitués d'aluminium, laissé à l'air libre, qui s'oxyde rapidement. Il conviendra donc de prendre en compte la couche d'alumine formée et d'examiner numériquement son influence sur la transmission du filtre. Si ce phénomène est nuisible, on pourra essayer de protéger l'aluminium par de la silice, par exemple.
- il est possible que la gravure FIB n'ait pas traversé l'aluminium partout.
- la gravure FIB n'a pas été alignée avec les bords des pixels. Les pixels situés sous les bords délimitant la zone gravée ne sont donc que partiellement recouverts de motifs, et ont donc une réponse plus faible.
- les boursoufflures, observables en Figure 68b, indiquent que la gravure FIB a partiellement décollé le dépôt d'aluminium.

Les dépôts métalliques et la gravure FIB doivent donc être améliorés pour la pro-

chaîne structure de test. Il faut conjointement complexifier les modèles en se rapprochant au mieux des géométries effectivement fabriquées, et déterminer de nouveaux paramètres géométriques pour le motif, adaptés, cette fois, au pixel directement.

Néanmoins, les réponses de ces "pixels diffractifs" sortent du courant d'obscurité. La lumière collectée a donc traversé le filtre diffractif et l'empilement diélectrique.

Nous avons donc mis au point un processus expérimental sain (décrit en Figure 67). À notre connaissance, c'est la première fois que des structures diffractives aussi complexes sont embarquées dans un pixel CMOS. Elles sont réalisées grâce à un instrument, le FIB, qui n'est pas intégré dans les chaînes de production. Il permet de graver des motifs plus petits (quelques dizaines de nanomètres) qu'en photo-lithographie (une centaine de nanomètres). Étant donnée l'évolution rapide de la technologie CMOS, on pourra, d'ici peu, réaliser ce type de gravure en ligne de production.

Conclusion partielle

Nous avons utilisé le modèle vectoriel, présenté et validé numériquement au chapitre 4, pour mener une étude paramétrique sur des bi-réseaux métalliques sub-longueur d'onde susceptibles de constituer un triplet de filtres colorés RVB. Il est apparu que les réseaux d'ouvertures annulaires, qui présentent des degrés de liberté supplémentaires par rapport aux trous ou aux plots, étaient les plus prometteurs pour cette application. Nous l'avons montré en simulant la reconstruction des couleurs d'une mire de Macbeth qui serait "vue" par un tel triplet de filtres RVB, arrangés en motif de Bayer. Enfin, nous avons montré qu'il est possible de réaliser et de caractériser spectralement des pixels CMOS munis de ces structures complexes.

Conclusion et perspectives

Conclusion générale

Le pixel d'imageur CMOS est une structure périodique à géométrie tri-dimensionnelle complexe, composée de matériaux diélectriques et métalliques. Nous avons identifié les limitations, inhérentes à sa miniaturisation, du filtrage spectral existant, par résines absorbantes. Indépendamment du contexte des imageurs, des pistes prometteuses dans le domaine émergent des filtres diffractifs à pas sub-longueur d'onde dans le visible, dits plasmoniques, ont été discutées. Pour prétendre remplacer les filtres actuels, les caractéristiques en transmission de ces filtres doivent être étudiées rigoureusement, en résolvant les équations de Maxwell. Nous avons mené cette étude dans un cadre défini par le motif de Bayer et l'espace couleur RVB, mais il faut noter que ces solutions ne sont pas les uniques possibilités de la reconstruction d'un image couleur.

Nous avons mis en place une méthode scalaire de résolution des équations de Maxwell en régime harmonique, basée sur une nouvelle formulation de la méthode des éléments finis. En se ramenant à un problème radiatif équivalent à sources localisées, et par l'utilisation de conditions de Bloch et de PML, nous avons rigoureusement levé les problèmes d'infinis intrinsèques à la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-dimensionnel. Cette méthode, très générale, permet de déterminer avec une grande précision les efficacités de diffraction dans les cas de polarisation TE et TM d'un réseau, pouvant contenir, par période, un ou plusieurs éléments diffractifs de géométries quelconques et constitués de matériaux à pertes et potentiellement z -anisotropes. Les motifs peuvent être enterrés dans un empilement multi-couches, éventuellement à pertes. Nous avons validé numériquement notre code en comparant les efficacités calculées à celles obtenues par d'autres méthodes indépendantes.

Afin de valider expérimentalement l'emploi de cette méthode, nous avons conçu,

fabriqué et caractérisé des structures de test CMOS, des photodiodes adaptées à une modélisation 2D contenant des réseaux de cuivre. À condition de connaître avec précision les permittivités de matériaux (spectroscopie ellipsométrique dans les mêmes conditions de dépôt) ainsi que la géométrie de la structure (coupes SEM), nous sommes capables de calculer l'efficacité Quantique de telles photodiodes. Les réseaux monodimensionnels présentent cependant une dépendance à la polarisation, incompatible avec les spécifications requises pour nos filtres.

Nous avons donc généralisé notre méthode scalaire au cas vectoriel de la diffraction d'une onde plane, d'angle d'incidence quelconque et arbitrairement polarisée, par un réseau croisé. Les réseaux croisés peuvent être constitués d'autant de couches et d'éléments diffractifs de géométrie quelconque que nécessaire. À ce titre, elle est adaptée à la géométrie torturée du pixel. Là où d'autres méthodes, plus traditionnellement utilisées pour l'étude de réseaux croisés, nécessitent des ajustements dans certains cas, notre méthode n'en requiert aucun. Nous l'avons illustré en retrouvant les efficacités des divers bi-réseaux décrits dans la littérature, et en proposant un bilan d'énergie complet sur un nouveau cas torique à pertes, un concentré de la plupart des difficultés rencontrées lors de la modélisation de bi-réseaux. Notons que la généralisation de notre formulation au cas complètement anisotrope est directe. Enfin, en remplaçant les conditions de quasi-périodicité par des PML, notre méthode s'adapte également aux problèmes de diffusion par un objet ou une surface rugueuse quelconque.

Nous avons exploité ces modèles vectoriels pour explorer les pistes bibliographiques récentes retenues en fin de chapitre 1. Une première étude paramétrique a permis d'identifier une configuration particulière permettant d'accorder le spectre transmis en fonction de la hauteur du réseau, déposé sur un substrat de verre. Il s'agit d'ouvertures annulaires pratiquées dans une couche d'aluminium ou d'argent. Nous avons ensuite testé les performances colorimétriques d'un tel triplet de filtres diffractifs RVB. Une première réalisation expérimentale, sur un pixel CMOS, montre qu'il est possible de réaliser ces structures et de les caractériser spectralement.

Perspectives

À ce jour, de multiples aspects à restent à étudier. En effet, pour chaque filtre, nous avons considéré un nombre infini de périodes. En adaptant seulement 7×7 motifs par pixel, la cellule de calcul à considérer devient telle que schématisée en Figure 71 (par soucis de clarté, seuls 2×2 motifs par pixel sont représentés). Il conviendra également de s'assurer de la stabilité angulaire de telles structures, ainsi que de l'indépendance à la polarisation incidente ($\varphi = 45^\circ$).

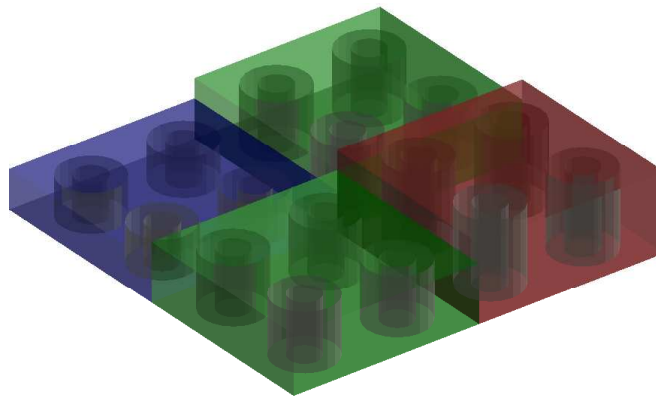


Figure 71: Comment la réponse spectrale du cas "infiniment périodique" est-elle modifiée en considérant un nombre fini de motifs disposés en motif de Bayer ?

L'étape de modélisation suivante consiste à placer ces structures dans l'empilement diélectrique complet des pixels, et de déterminer la hauteur la plus adaptée, ainsi que les nouveaux paramètres géométriques et matériels pour des réseaux à réaliser. Nous pouvons déjà importer et mailler (cf. Figure 72) la géométrie tri-dimensionnelle du pixel, issue des logiciels de Conception Assistée par Ordinateur (CAO).

Comme l'illustre la Figure 72a, les niveaux métalliques (en bleu) et la jonction (en vert) sont très complexes. D'après notre méthode, il conviendra d'écrire un terme source pour chacun d'eux, dépendant des caractéristiques de la couche dans laquelle il est enterré. Cette opération peut s'avérer fastidieuse, surtout lorsque nous considérerons la structure périodique complète représentée en Figure 73 (un motif de bayer diffractif disposé sur quatre pixels arrangés en architecture partagée 4T). Nous prévoyons de modifier la façon dont sont modélisées les sources dans notre modèle. Pour cela, il

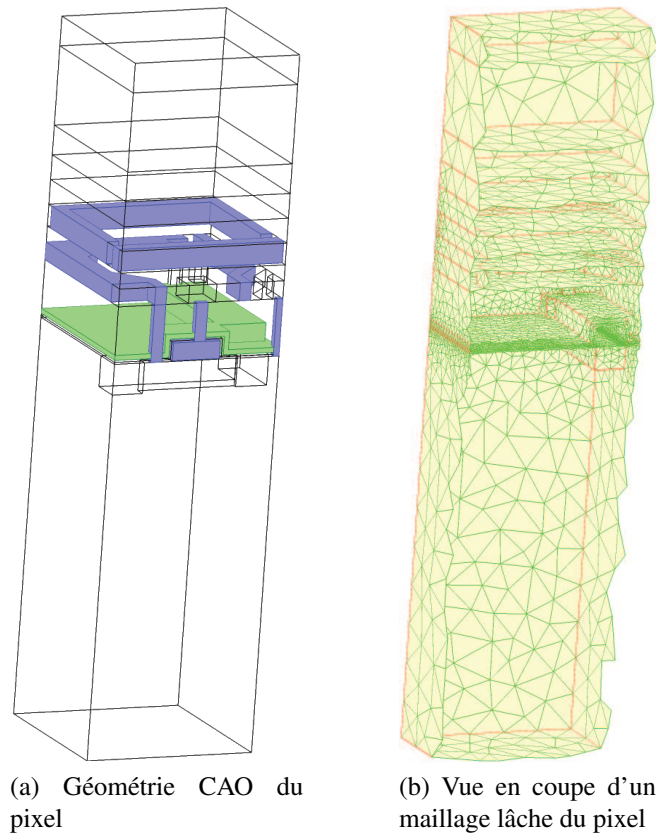


Figure 72: Géométrie (importée de représentations de CAO) et maillage 3D d'un pixel sans micro-lentille. Sur la Figure 72a, les niveaux de cuivre sont représentés en bleu.

est possible d'adapter la méthode dite de l'*antenne virtuelle* développée par Godard *et al.* [126]. L'opération consiste à ajouter un fil (ou une plaque en 3D) "invisible", parcouru(e) par un courant tel qu'une onde plane est rigoureusement générée dans le superstrat.

Une fois la carte du vecteur de Poynting obtenue dans le silicium, il sera aussi intéressant de considérer celle-ci comme une entrée des modèles de diffusion des porteurs de charge générés, pour calculer directement la réponse électrique du pixel. Ces modèles de diffusion des porteurs, couplés à un calcul du champ électromagnétique par la méthode FDTD, ont été développés à STMicroelectronics par Crocherie *et al.* (voir [74]).

Enfin, il s'agira de combiner les avancées résumées sur les Figures 72 et 71 pour

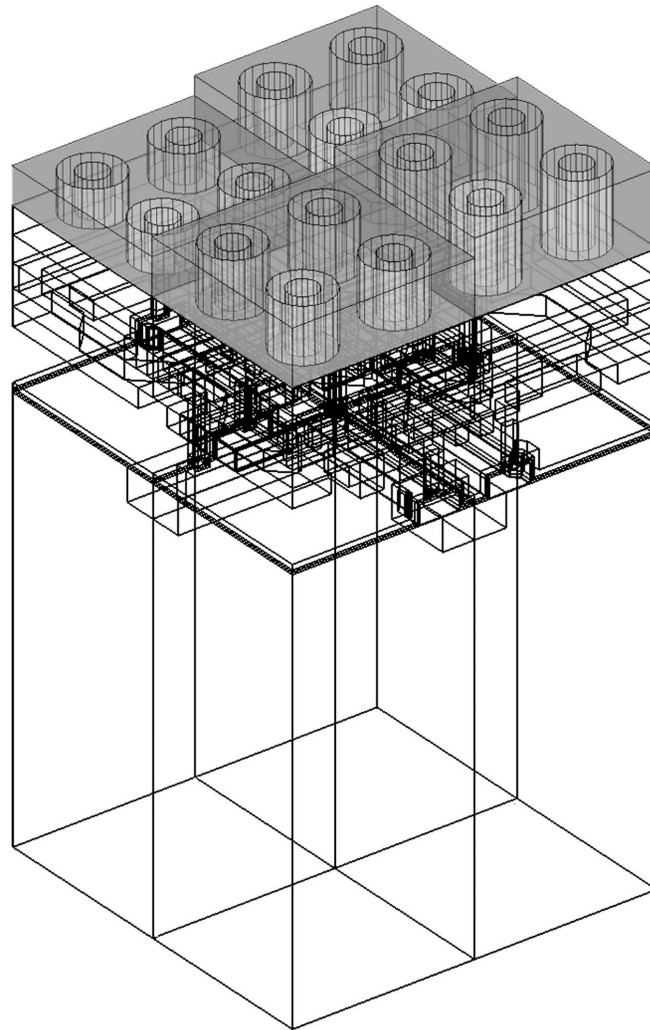


Figure 73: Géométrie du motif répété périodiquement sur une matrice CMOS.

modéliser un motif de Bayer complet muni de filtres diffractifs. On sera alors en situation d'optimiser avec rigueur les paramètres géométriques des structures diffractives pressenties. On pourra également étudier rigoureusement d'éventuelles micro-lentilles de Fresnel [50] adaptées au pixel.

D'un point de vue expérimental, en attendant que les finesses de gravure en photolithographie soient compatibles avec les motifs établis par le calcul, on pourra améliorer le procédé de gravure FIB, décrit au chapitre 5, de manière à graver des surfaces plus grandes avec une meilleure répétitivité.

Annexes

Annexe A

Calcul du champ électrique vectoriel dans un empilement multicouches

Cette annexe présente le calcul vectoriel du champ électrique dans les empilements multicouches. Ce calcul, abondamment traité en 2D, n'est généralement pas présenté dans la littérature. En effet, à moins de mener une étude de polarisation, les cas scalaires TE et TM suffisent souvent à la caractérisation de couches minces optiques, dont la géométrie présente généralement deux axes d'invariance. Pour le calcul du terme source vectoriel du chapitre 4, il est cependant indispensable de déterminer les trois composantes du champ électrique réponse à un empilement quelconque.

1 Problème et notations

On considère un empilement de $N - 2$ couches homogènes, isotropes, éventuellement à pertes, caractérisées par leur permittivité relative notée ϵ_n et leur épaisseur notée e_n . Cet empilement repose sur un substrat de même nature homogène, isotrope, éventuellement à pertes, caractérisé par sa permittivité relative notée ϵ_N . Enfin, le superstrat est caractérisé par sa permittivité relative notée ϵ_1 . On note z_i l'altitude de l'interface entre la couche i et la couche $i + 1$.

Le champ incident sur cette structure est noté :

$$\mathbf{E}^0 = \mathbf{A}_0^e \exp(-i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

avec

$$\mathbf{k}_0 = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \\ \gamma_0 \end{pmatrix} = k_0 \begin{pmatrix} \sin \theta_0 \cos \varphi_0 \\ \sin \theta_0 \sin \varphi_0 \\ \cos \theta_0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

et

$$\mathbf{A}_0^e = \begin{pmatrix} E_x^0 \\ E_y^0 \\ E_z^0 \end{pmatrix} = A^e \begin{pmatrix} \cos \psi_0 \cos \theta_0 \cos \varphi_0 - \sin \psi_0 \sin \varphi_0 \\ \cos \psi_0 \cos \theta_0 \sin \varphi_0 + \sin \psi_0 \cos \varphi_0 \\ -\cos \psi_0 \sin \theta_0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

où $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$, $\theta_0 \in [0, \frac{\pi}{2}]$ et $\psi_0 \in [0, \pi]$.

On recherche dans cette annexe l'unique couple (\mathbf{E}, \mathbf{H}) vérifiant les équations de Maxwell en régime harmonique :

$$\begin{cases} \text{curl } \mathbf{E} = i \omega \mu_0 \mu \mathbf{H} \\ \text{curl } \mathbf{H} = -i \omega \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E} \end{cases} \quad (\text{A.4a})$$

$$\quad \quad \quad (\text{A.4b})$$

2 Relation de récurrence vérifiée par les composantes transverses

2.1 Passage d'une interface $z = z_i$

En projetant l'équation de Helmholtz vectorielle sur les axes, on peut établir que le champ total s'écrit dans la couche indiquée i comme la somme d'une onde plane propagative et d'une onde plane contre-propagative :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \begin{pmatrix} E_x^{i,+} \\ E_y^{i,+} \\ E_z^{i,+} \end{pmatrix} \exp(i(\alpha_0 x + \beta_0 y + \gamma_i z)) + \begin{pmatrix} E_x^{i,-} \\ E_y^{i,-} \\ E_z^{i,-} \end{pmatrix} \exp(i(\alpha_0 x + \beta_0 y - \gamma_i z)) \quad (\text{A.5})$$

où

$$\gamma_i^2 = k_i^2 - \alpha_0^2 - \beta_0^2 \quad (\text{A.6})$$

Ce qui suit consiste à écrire la continuité des composantes tangentielles de (\mathbf{E}, \mathbf{H}) :

$$\Psi = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ iH_x \\ iH_y \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

La continuité de Ψ selon O_z et son expression dans les couches i et $i+1$ permet d'établir une relation de récurrence pour le système multicouche.

En projetant A.4a et A.4b sur O_x, O_y et O_z , il vient :

$$\begin{vmatrix} i\beta_0 H_z - \frac{\partial H_y}{\partial z} \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - i\alpha_0 H_z \\ i\alpha_0 H_y - i\beta_0 H_x \end{vmatrix} = -i\omega\varepsilon \begin{vmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{vmatrix} \quad (\text{A.8})$$

et

$$\begin{vmatrix} i\beta_0 E_z - \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - i\alpha_0 E_z \\ i\alpha_0 E_y - i\beta_0 E_x \end{vmatrix} = i\omega\mu \begin{vmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{vmatrix} \quad (\text{A.9})$$

On peut donc exprimer les composantes tangentielles de \mathbf{H} en fonction de celles de \mathbf{E} :

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \omega\mu & 0 & \beta_0 \\ 0 & \omega\mu & -\alpha_0 \\ -\beta_0 & \alpha_0 & -\omega\varepsilon \end{bmatrix}}_B \begin{bmatrix} iH_x \\ iH_y \\ iH_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ -\frac{\partial E_x}{\partial z} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

En remarquant l'invariance et la linéarité du problème selon O_x et O_y , on peut s'affranchir de la dépendance en x et y et adopter les notations suivantes :

$$\begin{cases} U_x^{i,\pm} = E_x^{i,\pm} \exp(\pm i\gamma_i z) \\ U_y^{i,\pm} = E_y^{i,\pm} \exp(\pm i\gamma_i z) \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

$$\Phi_j = \begin{vmatrix} U_x^{+,j+1} \\ U_x^{-,j+1} \\ U_y^{+,j+1} \\ U_y^{-,j+1} \end{vmatrix} \quad (\text{A.12})$$

D'après A.5 et A.9, et en posant $M = B^{-1}$, on a dans la couche indiquée i :

$$\Psi(x, y, z) = \exp(i(\alpha_0 x + \beta_0 y)) \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \gamma_i M_{12}^j & -\gamma_i M_{12}^j & -\gamma_i M_{11}^j & \gamma_j M_{11}^j \\ \gamma_i M_{22}^j & -\gamma_i M_{22}^j & -\gamma_i M_{21}^j & \gamma_j M_{21}^j \end{bmatrix}}_{\Pi_j} \begin{vmatrix} U_x^{+,j} \\ U_x^{-,j} \\ U_y^{+,j} \\ U_y^{-,j} \end{vmatrix} \quad (\text{A.13})$$

Finalement, la continuité de Ψ à l'interface $z = z_j$ entraîne :

$$\Phi_{j+1}(z_j) = \Pi_{j+1}^{-1} \Pi_j \Phi_{j+1}(z_j) \quad (\text{A.14})$$

Les composantes normales peuvent se déduire en utilisant l'Éq. (A.8) et l'Éq. (A.9).

2.2 Transport dans une couche d'épaisseur e_i

D'après Eq.A.5, un simple déphasage permet de passer de l'altitude z_{i-1} à l'altitude z_i :

$$\Phi_j(z_{j-1}) = \underbrace{\begin{bmatrix} \exp(+i\gamma_j e_j) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-i\gamma_j e_j) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(+i\gamma_j e_j) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-i\gamma_j e_j) \end{bmatrix}}_{T_j} \Phi_j(z_j) \quad (\text{A.15})$$

A partir de Eq.(A.15) et Eq.(A.14), une relation de récurrence peut donc être établie :

$$\Phi_{j+1}(z_{j+1}) = T_{j+1} \Pi_{j+1}^{-1} \Pi_j \Phi_j(z_j) \quad (\text{A.16})$$

3 Coefficients de réflexion/transmission

La dernière étape de ce calcul est la détermination du premier terme Φ_1 , qui n'est pas entièrement connu, puisque seuls $U_x^{1,+}$ et $U_y^{1,+}$ le sont. Ceci est levé en considérant l'hypothèse de Condition d'Onde Sortante traduisant directement le fait qu'aucune onde plane ne "remonte" dans le substrat : $U_y^{N,-}$ et $U_x^{N,-}$ sont nuls. Le système suivant comprend par conséquent quatre inconnues $U_x^{1,-}$, $U_y^{1,-}$, $U_y^{N,+}$ et $U_x^{N,+}$ vérifiant les quatre équations suivantes :

$$\Phi_N(z_{N-1}) = \Pi_{2+1}^{-1} \Pi_1 \prod_{j=2}^N T_{j+1} \Pi_{j+1}^{-1} \Pi_j \Phi_1(z_1) \quad (\text{A.17})$$

Le calcul des coefficients de transmission, largement répandue en 2D, peut donc être ici généralisé. Enfin, Φ_N se trouve parfaitement défini et la relation Eq.(A.16) permet d'accéder à l'expression analytique du champ dans chaque couche. Cette expression est indispensable au calcul du terme source introduit au chapitre 4.

Annexe B

Étude de l'influence des paramètres de réseaux croisés métalliques sur verre

On se propose, dans cette annexe, d'observer l'effet des paramètres opto-géométriques des réseaux de trous circulaires, de plots circulaires et d'ouvertures coaxiales dans une couche métallique (d'aluminium, d'argent ou de cuivre) sur le spectre en transmission ($T_{0,0}(\lambda)$). Les différents paramètres sont définis en Figure 74. On considère les périodes fixées de sorte que $d_x = d_y = 300$ nm. Les légères oscillations, observables dans les spectres présentés, sont dues aux maillages relativement lâches utilisés, pour obtenir un temps de simulation raisonnable. L'étude de convergence menée au chapitre 4 (partie 3.2.1) a montré que les résultats obtenus avec ces maillages sont une bonne approximation des valeurs théoriques.

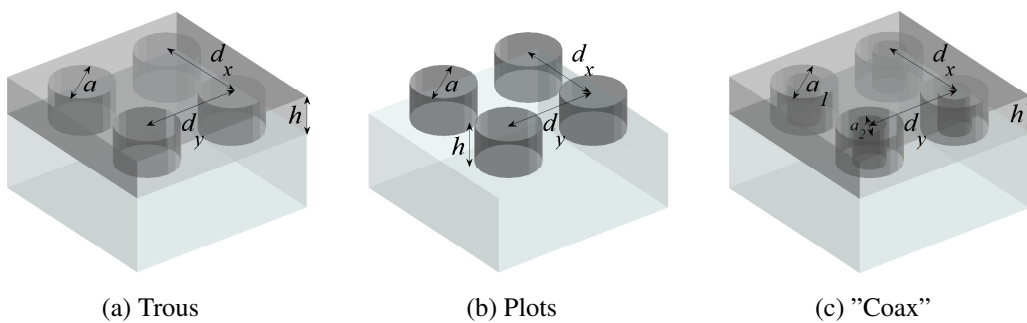


Figure 74: Définition des paramètres géométriques d'étude

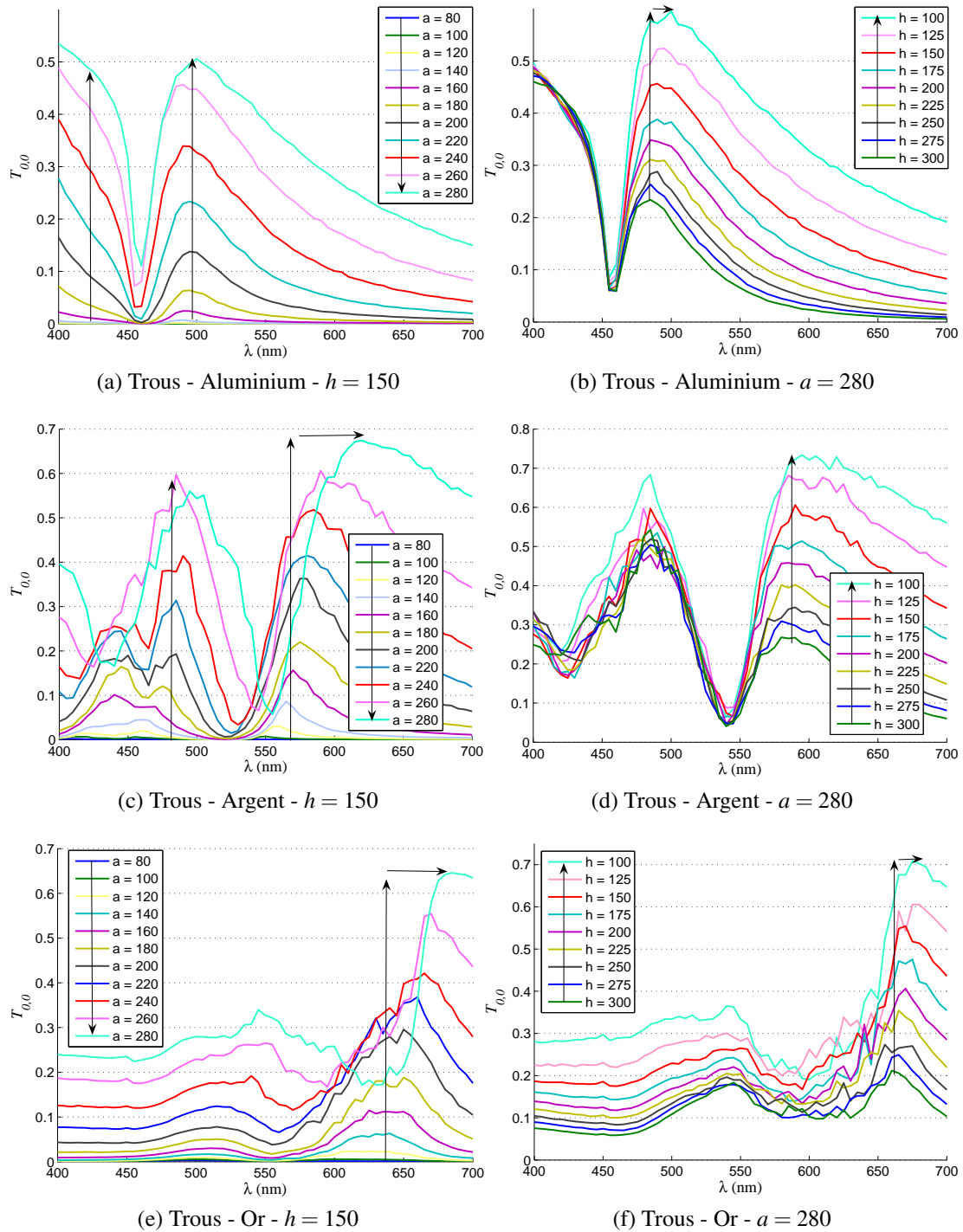


Figure 75: Influence des paramètres a et h , à périodes fixes $d_x = d_y = 300$, sur $T_{0,0}$ pour un réseau de trous circulaires sur verre (dimensions en nm)

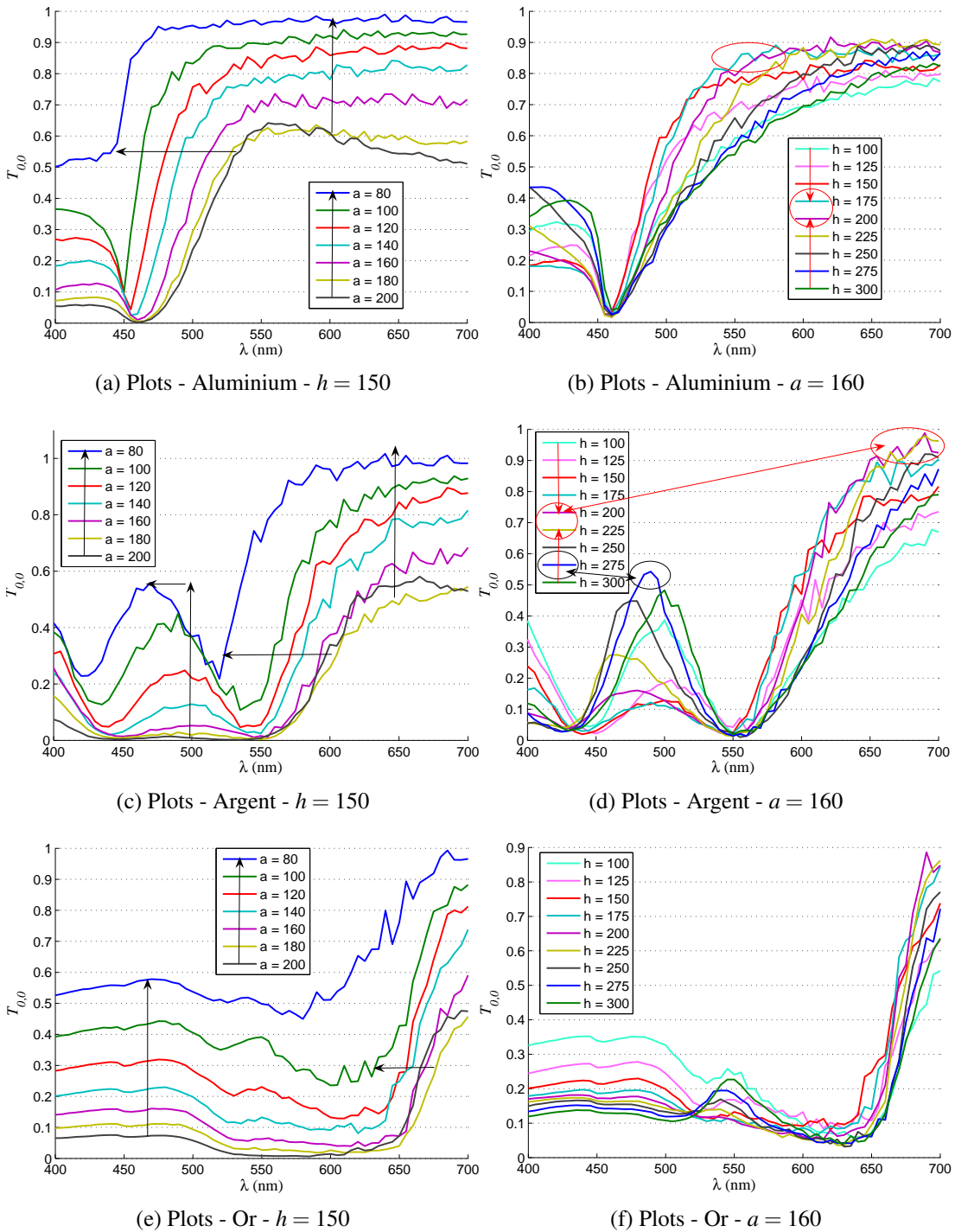


Figure 76: Influence des paramètres a et h , à périodes fixes $d_x = d_y = 300$, sur $T_{0,0}$ pour un réseau de plots circulaires sur verre (dimensions en nm)

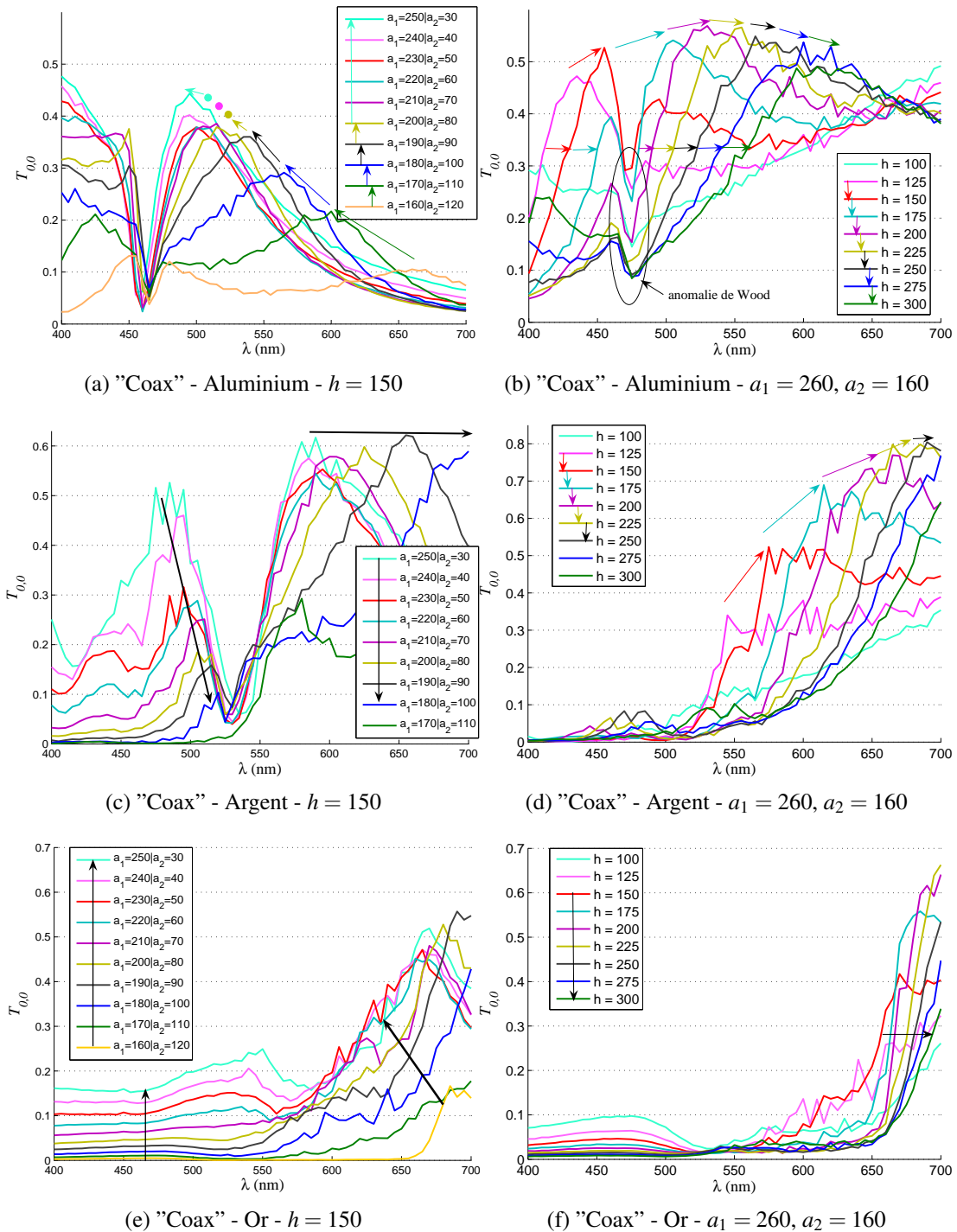


Figure 77: Influence des paramètres $(a_1 - a_2)$ et h , à périodes fixes $d_x = d_y = 300$, sur $T_{0,0}$ pour un réseau d'ouvertures annulaires sur verre (dimensions en nm)

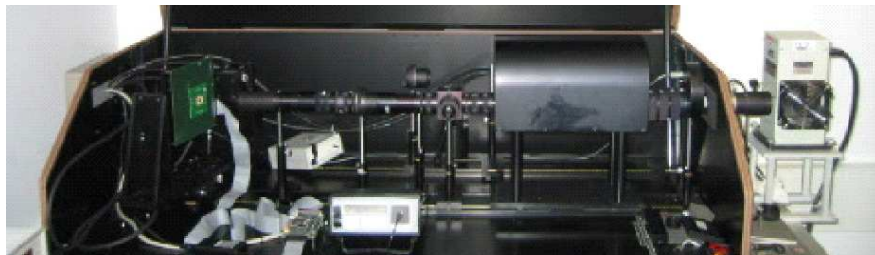
Annexe C

Bancs de mesure optique

Sur les bancs, plusieurs configurations sont possibles : étude en faisceau collimaté ou diffus, en lumière blanche ou "monochromatique". Ils sont équipés de systèmes de caractérisation angulaire permettant de déterminer la réponse optique du capteur en fonction de l'angle d'incidence, et de l'angle d'ouverture de la source illuminant le capteur. On reproduit ainsi fidèlement les conditions d'éclairement d'une prise de vue photographique. Vaillant *et al.* ont montré [127] qu'il était possible d'approcher la source de ce montage (divergente, diffuse et non polarisée) comme une superposition d'un nombre fini d'ondes planes.

Le premier banc (cf. Figures 78a et 79a) dispose d'une lampe halogène 250 W, d'un obturateur, d'un filtre infrarouge, de plusieurs densités optiques, de filtres interférentiels Rouge, Vert et Bleu placés dans une roue à filtres. En sortie de cette dernière, le faisceau incident rencontre une lame séparatrice qui transmet la moitié du flux vers la puce à tester, et l'autre moitié vers une photodiode de référence.

Le second banc (cf. Figures 78b et 79b), quant à lui, est muni d'un monochromateur à la place des roues à filtres. C'est ce banc qui permet de déterminer les $QE(\lambda)$ sur tout le domaine du visible [380nm, 720nm]. On admettra qu'il est indispensable d'effectuer d'abord une mesure en lumière blanche sur le banc n°1 pour avoir accès au QE sur le banc n°2. De plus, la mesure en trois points du spectre visible sur le banc n°1 grâce aux trois filtres interférentiels, permet de juger de la qualité de la mesure sur le banc n°2 .

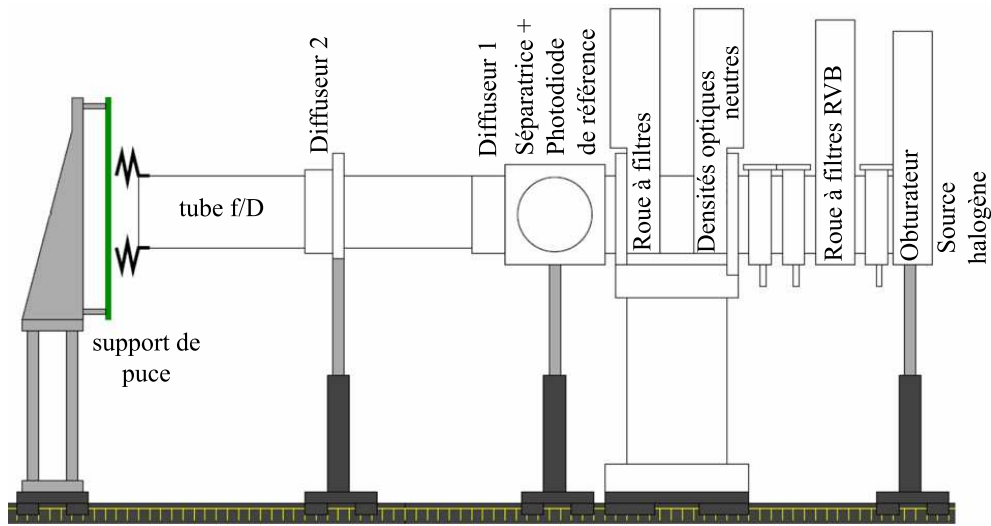


(a) Banc n°1

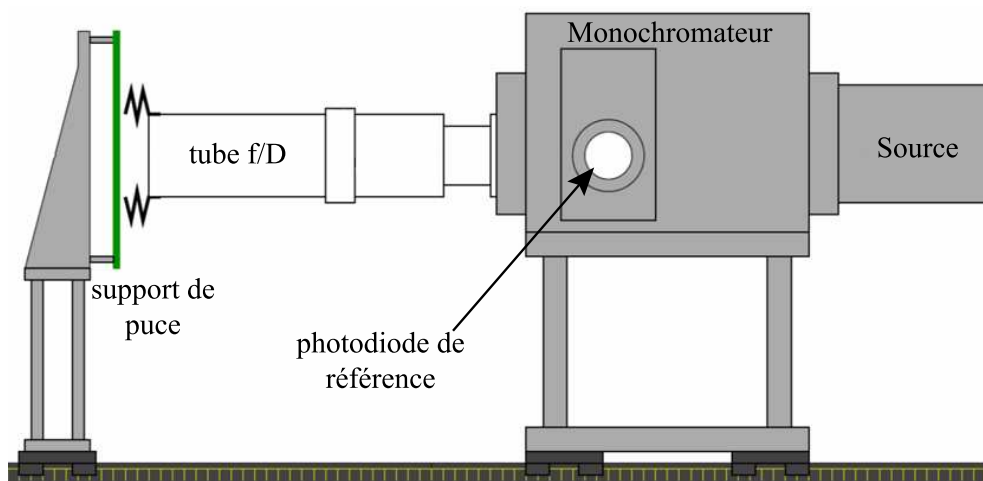


(b) Banc n°2

Figure 78: Bancs de caractérisation spectrale



(a) Banc n°1



(b) Banc n°2

Figure 79: Schéma des bancs de caractérisation spectrale

Annexe D

Glossaire

CMOS : Complementary Metal Oxide Semi-conductor

CCD : Charge-Coupled Device

FEM : Finite Element Method

FMM : Fourier Modal Method

RCWA : Rigorous Coupled-Wave Analysis

Méthode C : Méthode de Chandezon

FDTD : Finite-Difference Time-Domain

PML : Perfectly Matched Layer

PBC : Periodic Boundary Condition

DDL : Degré De Liberté

QE : Quantum Efficiency

Front-end : correspond à la première phase du cycle de production, comprenant la fabrication des circuits sur les tranches de silicium, suivie du tri électrique des tranches et de la phase de back-end.

Back-end : correspond à la seconde phase de la fabrication au cours de laquelle le circuit en silicium est monté dans un boîtier conçu, non seulement pour le protéger, mais aussi pour assurer des connexions avec l'extérieur par le biais de fils très fins.

Pads : plots métalliques qui permettent de connecter la puce

M1 : Métal 1, premier niveau de métal déposé

M2 : Métal 2, second niveau de métal déposé

wafer : plaquette ou tranche de silicium

Backside imaging : illumination face arrière

TSV : Through Silicon Via

SEM : Scanning Electron Microscope

CAO : Conception Assistée par Ordinateur

Bibliographie

- [1] F. Delamare et B. Guineau. *Les matériaux de la couleur*. Paris, Gallimard Découvertes, 1999.
- [2] B. E. Bayer. Color imaging array, July 20 1976. U.S. Patent 11,341,206.
- [3] P. Magnan. Detection of visible photons in CCD and CMOS : A comparative view. *Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res., A*, 504(1-3) :199–212, 2003.
- [4] E. R. Fossum. CMOS image sensors : Electronic camera-on-a-chip. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 13 :1689–1698, 1997.
- [5] E. R. Fossum. Architectures for focal plane image processing. *Opt. Eng.*, 28(8) :865–871, 1989.
- [6] G. E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, 38(8), 1965.
- [7] J. Janesick, J. T. Andrews and T. Elliott. Fundamental performance differences between CMOS and CCD imagers : Part 1. In *Proceedings of SPIE*, volume 6276, page 62760M, 2006.
- [8] J. Janesick, J. Andrews, J. Tower, M. Grygon, T. Elliott, J. Cheng, M. Lesser and J. Pinter. Fundamental performance differences between CMOS and CCD imagers : Part II. In *Proceedings of SPIE*, volume 6690, page 669003, 2007.
- [9] M. Bigas, E. Cabruja, E., J. Forest and J. Salvi. Review of CMOS image sensors. *Microelectronics Journal*, 37(5) :433–451, 2006.
- [10] B. Dunne, C. Fossati and O. Gagliano. CMOS imaging device comprising a microlens array exhibiting a high filling rate, 2007. USPTO Patent Application 20080290383.

- [11] A. Assadi and K. Raj. Microlens and photodetector, December 16 2003. U.S. Patent 6,665,014.
- [12] S. K. Mendis, S. E. Kemeny, R. C. Gee, B. Pain, Q. Kim and E. R. Fossum. Progress in CMOS active pixel image sensors. In *Proceedings of SPIE*, volume 2172, pages 19–29, 1994.
- [13] K. D. Munck, J. Bogaerts, D. S. Tezcan, P. D. Moor, S. Sedky and C. V. Hoof. Backside thinned CMOS imagers with high broadband quantum efficiency realised using new integration process. *Elect. Lett.*, 44(1) :50–52, 2008.
- [14] P. L. Dillon, A. T. Brault, J. R. Horak, E. Garcia, T. W. Martin and W. A. Light. Fabrication and Performance of Color Filter Arrays for Solid-State Imagers. *Solid-State Circuits, IEEE Journal of*, 13(1) :23–27, 1978.
- [15] S. Guerroudj, F. Roy and J-L. Deschanvres. Inorganic color filters by MOCVD for CMOS imager and colorimetry. In *Proc. of SPIE*, volume 7001, page 700109, 2008.
- [16] D. G. Green. The contrast sensitivity of the colour mechanisms of the human eye. *J. of Physiology*, 196(2) :415–429, 1968.
- [17] K. Gorokhovskiy, J. A. Flint and S. Datta. Alternative color filter array layouts for digital photography. *Research in Microelectronics and Electronics 2006, Ph. D.*, pages 265–268, 2006.
- [18] K. A. Parulski. Color filters and processing alternatives for one-chip cameras. *IEEE Transactions on Elec. Dev.*, 32(8) :1381–1389, 1985.
- [19] D. Alleysson. 30 ans de démosaïçage. *TS. Traitement du signal*, 21(6) :561–581, 2004.
- [20] I. Shcherback and O. Yadid-Pecht. CMOS APS MTF modeling. *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, 48(12) :2710–2715, 2001.
- [21] R. L. Baer, W. D. Holland, J. Holm and P. Vora. A Comparison of Primary and Complementary Color Filters for CCD-based Digital Photography. In *Proc. of SPIE Electronic Imaging Conference*, page 16, 1999.
- [22] J. E. Andams, J. F. Hamilton and M. O’Brien. Interpolation of panchromatic and color pixels, January 2006. U.S. Patent 3,971,065.

-
- [23] R. B. Merrill. Color separation in an active pixel cell imaging array using a triple-well structure, 1976. U.S. Patent 3,975,760.
- [24] H. Hoshuyama. Color separation device of solid-state image sensor, November 21 2006. US Patent 7,138,663.
- [25] Y. Inaba, M. Kasano, K. Tanaka and T. Yamaguchi. Degradation-Free MOS Image Sensor With Photonic Crystal Color Filter. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 27(6) :457, 2006.
- [26] S. Koyama, Y. Inaba, M. Kasano and T. Murata. A Day and Night Vision MOS Imager With Robust Photonic-Crystal-Based RGB-and-IR. *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, 55(3) :754–759, 2008.
- [27] B. Munk. *Frequency selective surfaces*. John Wiley New York, 2000.
- [28] J. Provine, J. L. Skinner and D. A. Horsley. Tunable Subwavelength Metal Gratings in the Mid-IR Band. *IEEE Journal of Sel. Topics in Quant. Elec.*, 13(2) :270–276, 2007.
- [29] E. Topsakal and J. L. Volakis. Frequency selective volumes for optical spatial filters. *Ant. and Wire. Prop. Lett.*, 3, 2004.
- [30] A. Lüker, H. Hein, J. Schulz, N. Dambrowsky, O. Sternberg, M. J. Sweetgall, K. Abdijalilov, K. D. Möller and H. Grebel. Band pass filters in the $1\mu\text{m}$ spectral region : Thick metal screens. *Infrared Physics and Technology*, 51(3) :178–185, 2008.
- [31] D. Van Labeke, D. Gérard, B. Guizal, F. I. Baida and L. Li. An angle-independent Frequency Selective Surface in the optical range. *Opt. Express*, 14(25) :11945–11951, 2006.
- [32] T. F. Anderson and A. G. Richards Jr. An Electron Microscope Study of Some Structural Colors of Insects. *J. of Appl. Phys.*, 13 :748–758, 1942.
- [33] B. Gralak, G. Tayeb and S. Enoch. Morpho butterflies wings color modeled with lamellar grating theory. *Opt. Express*, 9(11) :567–578, 2001.
- [34] P. Vukusic, J. R. Sambles, C. R. Lawrence and R. J. Wootton. Quantified interference and diffraction in single Morpho butterfly scales. *Proc. of the Royal Society B : Biological Sciences*, 266(1427) :1403, 1999.

- [35] G. Xie, G. Zhang, F. Lin, J. Zhang, Z. Liu and S. Mu. The fabrication of subwavelength anti-reflective nanostructures using a bio-template. *IOP Nano*, 19(9) :95605, 2008.
- [36] R. Bouffaron, L. Escoubas, J-J. Simon, P. Torchio, F. Flory, G. Berginc and P. Masclet. Enhanced antireflecting properties of micro-structured top-flat pyramids. *Opt. Express*, 16(23) :19304–19309, 2008.
- [37] H. Dammann. Color separation gratings. *Appl. Opt.*, 17(15) :2273–2279, 1978.
- [38] L. L. Doskolovich, N. L. Kazanskiy, S. N. Khonina, R. V. Skidanov, N. Heikkilä, S. Siitonen and J. Turunen. Design and investigation of color separation diffraction gratings. *Appl. Opt.*, 46(15) :2825–2830, 2007.
- [39] M. W. Farn, M. B. Stern, W. B. Veldkamp and S. S. Medeiros. Color separation by use of binary optics. *Opt. Lett.*, 18 :1214–1214, 1993.
- [40] B. Layet, I. G. Cormack and M. R. Taghizadeh. Stripe color separation with diffractive optics. *Appl. Opt.*, 38(35), 1999.
- [41] N. Tossavainen, M. Kuittinen and T. Vallius. Producing illumination-independent additively mixed colors by diffractive optics. *J. Opt. Soc. Am. A*, 23(5) :981–985, 2006.
- [42] K. Knop. Diffraction gratings for color filtering in the zero diffraction order. *Appl. Opt.*, 17 :3598–3603, 1978.
- [43] K. Knop. Diffractive Color Filters, August 1981. U.S. Patent 4,255,019.
- [44] C.F. Mateus, M. C. Huang, Y. Deng, A. R. Neureuther and C. J. Chang-Hasnain. Ultrabroadband mirror using low-index cladded subwavelength grating. *IEEE Phot. Tech. Lett.*, 16(2) :518–520, 2004.
- [45] M. Auslender, D. Levy and S. Hava. One-dimensional antireflection gratings in (100) silicon : a numerical study. *Appl. Opt.*, 37(2), 1998.
- [46] B. Päiväranta, N. Heikkilä and M. Kuittinen. Antireflective subwavelength-structured surfaces with enhanced color properties. *J. Opt. Soc. Am. A*, 24(6) :1680–1686, 2007.

-
- [47] R. Magnusson and M. Shokooh-Saremi. Widely tunable guided-mode resonance nanoelectromechanical RGB pixels. *Opt. Express*, 15(17) :10903–10910, 2007.
- [48] Y. Kanamori, M. Shimono and K. Hane. Fabrication of transmission color filters using silicon subwavelength gratings on quartz substrates. *IEEE Phot. Tech. Lett.*, 18 :2126–2128, 2006.
- [49] Y. T. Yoon, H. S. Lee, S. S. Lee, S. H. Kim, J. D. Park and K. D. Lee. Color filter incorporating a subwavelength patterned grating in poly silicon. *Opt. Express*, 16 :2374–2380, 2008.
- [50] K. Onozawa, K. Toshikiyo, T. Yogo, M. Ishii, K. Yamanaka, T. Matsuno and D. Ueda. A MOS Image Sensor With a Digital-Microlens. *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, 55(4) :986–991, 2008.
- [51] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio and P. A. Wolff. Extraordinary transmission through subwavelength holes arrays. *Nature*, 391 :667–669, 1998.
- [52] C. Genet and T. W. Ebbesen. Light in tiny holes. *Nature*, 445 :39–46, 2007.
- [53] W. L. Barnes, A. Dereux and T. W. Ebbesen. Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424 :824–830, 2003.
- [54] H. S. Lee, Y. T. Yoon, S. S. Lee, S. H. Kim and K. D. Lee. Color filter based on a subwavelength patterned metal grating. *Opt. Express*, 15 :15457–15463, 2007.
- [55] A. Moreau, G. Granet, F. Baida and D. Van Labeke. Light transmission by subwavelength square coaxial aperture arrays in metallic films. *Opt. Express*, 11(10) :1131–1136, 2003.
- [56] Y. Poujet, J. Salvi and F. I Baida. 90 percent extraordinary optical transmission in the visible range through annular aperture metallic arrays. *Opt. Lett.*, 32(20) :2942–2944, 2007.
- [57] P. B. Catrysse and B. A. Wandell. Integrated color pixels in 0.18- μm complementary metal oxide semiconductor technology. *J. Opt. Soc. Am. A*, 20 :2293–2306, 2003.

- [58] P. B. Catrysse, W. Suh and S. Fan. One-mode model for patterned metal layers inside integrated color pixels. *Opt. Lett.*, 29 :974–976, 2004.
- [59] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A* , 71 :811–818, 1981.
- [60] K. Rokushima and J. Yamanaka. Analysis of anisotropic dielectric gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 73 :901–908, 1983.
- [61] L. Li. New formulation of the fourier modal method for crossed surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 14 :10 :2758–2767, 1997.
- [62] J. Chandezon, G. Raoult and D. Maystre. A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application. *J. of Optics*, 11(4) :235–241, 1980.
- [63] L. Li. Oblique-coordinate-system-based chandezon method for modeling one-dimensionally periodic, multilayer, inhomogeneous, anisotropic gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 16 :2521–2531, 1999.
- [64] K. Watanabe. Numerical integration schemes used on the differential theory for anisotropic gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 19 :2245–2252, 2002.
- [65] D. Maystre. A new general integral theory for dielectric coated gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 68 :490–495, 1978.
- [66] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Ant. Prop.*, AP-14 :302–307, 1966.
- [67] W. M. Saj. Fdtd simulations of 2d plasmon waveguide on silver nanorods in hexagonal lattice. *Opt. Express*, 13 :4818–4827, 2005.
- [68] T. Delort and D. Maystre. Finite-element method for gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 2592–2601 :10, 1993.
- [69] Y. Ohkawa, Y. Tsuji and M. Koshiba. Analysis of anisotropic dielectric grating diffraction using the finite-element method. *J. Opt. Soc. Am. A* , 13 :1006–1012, 1996.

-
- [70] G. Bao, Z. Chen and H. Wu. Adaptive finite-element method for diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 22 :1106–1114, 2005.
- [71] F. Zolla and R. Petit. Method of fictitious sources as applied to the electromagnetic diffraction of a plane wave by a grating in conical mounts. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13 :796–802, 1996.
- [72] L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13 :1870–1876, 1996.
- [73] G. Granet. Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution. *J. Opt. Soc. Am. A*, 16(10) :2510–2516, 1999.
- [74] A. Crocherie, J. Vaillant and F. Hirigoyen. Three-dimensional broadband FDTD optical simulations of CMOS image sensor. In *Proceedings of SPIE*, volume 7100, page 71002J, 2008.
- [75] R. Petit. *Electromagnetic Theory of Gratings*. Springer Verlag, Berlin, 1980.
- [76] Y. Ould Agha, F. Zolla, A. Nicolet and S. Guenneau. On the use of PML for the computation of leaky modes : an application to gradient index mof. *COMPEL*, 27-1 :95–109, 2008.
- [77] H. A. Macleod. *Thin Film Optical Filters*. New York :Macmillan, 2001.
- [78] J-P. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.*, 114 :185–200, 1994.
- [79] M. Lassas, J. Liukkonen and E. Somersalo. Complex riemannian metric and absorbing boundary condition. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 80 :739–768, 2001.
- [80] M. Lassas, J. Liukkonen and E. Somersalo. Analysis of the PML equations in general convex geometry. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, 131 :1183–1207, 2001.
- [81] A. Nicolet, F. Zolla, Y. Ould Agha and S. Guenneau. Leaky modes in twisted microstructured optical fibres. *Waves in Random and Complex Media*, 17 :4 :559–570, 2007.

- [82] G. Bao and H. Wu. On the convergence of the solutions of PML equations for time harmonic maxwell's equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43 :2121–2143, 2005.
- [83] S. Guenneau, A. Nicolet, F. Zolla, C. Geuzaine and B. Meys. A finite element formulation for spectral problems in optical fibers. *COMPEL*, 20(1) :120–31, 2001.
- [84] A. Nicolet, S. Guenneau, C. Geuzaine and F. Zolla. Modeling of electromagnetic waves in periodic media with finite elements. *J. Comput. Appl. Math.*, 168 1-2 :321–329, 2004.
- [85] F. Zolla, G. Renversez, A. Nicolet, B. Khulmeyer, S. Guenneau and D. Felbacq. *Foundations of Photonic Crystal Fibres*. Imperial College Press, London, 2005.
- [86] P. Helluy, S. Maire and P. Ravel. Intégrations numériques d'ordre élevé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle. *CR. Acad. Sci. Paris, Sér. I, Math*, 327 :843–848, 1998.
- [87] D. J. Michels, T. L. Mikes and W. R. Hunter. Optical grating evaluator : a device for detailed measurement of diffraction grating efficiencies in the vacuum ultraviolet. *Appl. Opt.*, 13 :5 :1223–1229, 1974.
- [88] G. Bao, Z. Chen and H. Wu. Adaptive finite-element method for diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 22 :1106–1114, 2005.
- [89] G. Tayeb. *Contribution à l'étude de la diffraction des ondes électromagnétiques par des réseaux. Réflexions sur les méthodes existantes et sur leur extension aux milieux anisotropes*. PhD Thesis, Université Paul Cézanne, 1990.
- [90] G. Demésy, F. Zolla, A. Nicolet, M. Commandré and C. Fossati. The finite element method as applied to the diffraction by an anisotropic grating. *Optics Express*, 15 :18089–18102, 2007.
- [91] T. Waechtler, B. Gruska, S. Zimmermann, S. E. Schulz and T. Gessner. Characterization of Sputtered Ta and TaN Films by Spectroscopic Ellipsometry. In *ICSICT'06, 8th Int Conf on*, pages 2184–2186, 2006.
- [92] M. J. Weber. *Handbook of Optical Materials*. CRC Press, Florida, 2003.

-
- [93] G. Demésy, F. Zolla, A. Nicolet, M. Commandré, C. Fossati, O. Gagliano, S. Ricq and B. Dunne. Finite element method as applied to the study of gratings embedded in complementary metal-oxide semiconductor image sensors. *Optical Engineering*, 48(5) :058002, 2009.
- [94] M. G. Moharam, E. B. Grann, D. A. Pommet and T. K. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 12 :5 :1068–1076, 1995.
- [95] E. Noponen and J. Turunen. Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles. *J. Opt. Soc. Am. A* , 11 :9 :2494–2502, 1994.
- [96] T. Schuster, J. Ruoff, N. Kerwien, S. Rafler and W. Osten. Normal vector method for convergence improvement using the rcwa for crossed gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 24 :9 :2880–2890, 2007.
- [97] E. Popov and M. Nevière. Maxwell equations in Fourier space : fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media. *J. Opt. Soc. Am. A* , 18(11) :2886–2894, 2001.
- [98] P. Vincent. A finite-difference method for dielectric and conducting crossed gratings. *Opt. Communications*, 26(3), 1978.
- [99] D. Maystre and M. Neviere. Electromagnetic theory of crossed gratings. *J. of Optics*, 9 :301–306, 1978.
- [100] G. H. Derrick, R. C. McPhedran, D. Maystre and M. Nevière. Crossed gratings : A theory and its applications. *Appl. Phys. B*, 18(1) :39–52, 1979.
- [101] R. C. McPhedran, G. H. Derrick, M. Neviere and D. Maystre. Metallic crossed gratings. *J. of Optics*, 13 :209–218, 1982.
- [102] G. Granet. Analysis of diffraction by surface-relief crossed gratings with use of the chandezon method : application to multilayer crossed gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 15 :5 :1121–1131, 1998.
- [103] J. B. Harris, T. W. Preist, J. R. Sambles, R. N. Thorpe and R. A. Watts. Optical response of bigratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 13 :2041–2049, 1996.

- [104] J. J. Greffet, C. Baylard and P. Versaevel. Diffraction of electromagnetic waves by crossed gratings : a series solution. *Opt. Lett.*, 17 :1740–1742, 1992.
- [105] O. P. Bruno and F. Reitich. Numerical solution of diffraction problems : a method of variation of boundaries. III. doubly periodic gratings. *J. Opt. Soc. Am. A* , 10 :12 :2551–2562, 1993.
- [106] O. P. Bruno and F. Reitich. Boundary-variation solutions for bounded-obstacle scattering problems in three dimensions. *J. of Acoust. Soc. of Am.*, 104 :2579, 1998.
- [107] K. S. Yee and J. S. Chen. The finite-difference time-domain (FDTD) and the finite-volumetime-domain (FVTD) methods in solving Maxwell's equations. *IEEE Trans. Ant. Prop.*, 45(3) :354–363, 1997.
- [108] R. Qiang, J. Chen, T. Zhao, S. Wang, P. Ruchhoeft and M. Morgan. Modelling of infrared bandpass filters using three-dimensional FDTD method. *Elec. Lett.*, 41(16) :43–44, 2005.
- [109] C. Oh and M. J. Escuti. Numerical analysis of polarization gratings using the finite-difference time-domain method. *Phys. Rev. A*, 76(4) :43815, 2007.
- [110] M. Loncar, D. Nedeljkovic, T. P. Pearsall, J. Vuckovic, A. Scherer, S. Kuchinsky and D. C. Allan. Experimental and theoretical confirmation of Bloch-mode light propagation in planar photonic crystal waveguides. *Appl. Phys. Lett.*, 80(10), 2002.
- [111] F. Hirigoyen, A. Crocherie, J. M. Vaillant and Y. Cazaux. FDTD-based optical simulations methodology for CMOS image sensors pixels architecture and process optimization. In *Proc. of SPIE*, volume 6816, page 681609, 2008.
- [112] J. L. Volakis, A. Chatterjee and L. C. Kempel. Review of the finite-element method for three-dimensional electromagnetic scattering. *J. Opt. Soc. Am. A* , 11 :1422–1422, 1994.
- [113] A. Bossavit. Solving Maxwell equations in a closed cavity, and the question of spurious modes. *IEEE Trans. on Magnetism*, 26(2) :702–705, 1990.
- [114] A. Bossavit and I. Mayergoyz. Edge-elements for scattering problems. *IEEE Trans. on Magnetism*, 25(4) :2816–2821, 1989.

-
- [115] M. F. Wong, O. Picon and V. Fouad Hanna. The impact of Whitney forms on computational electromagnetics. In *Antennas and Propagation Society International Symposium*, volume 3, 1994.
- [116] A. Bossavit. Whitney forms : a class of finite elements for three-dimensional computations in electromagnetism. In *IEE Proc. A : Science, Measurement and Technology*, volume 135, pages 493–500, 1988.
- [117] T. V. Yioultsis and T. D. Tsiboukis. Development and implementation of second and third order vector finite elements in various 3-D electromagnetic field problems. *IEEE Trans. on Magnetics*, 33(2 Part 2) :1812–1815, 1997.
- [118] R. Petit. *Ondes électromagnétiques en radioélectricité et en optique*. Masson, 1993.
- [119] R. Bräuer and O. Bryngdahl. Electromagnetic diffraction analysis of two-dimensional gratings. *Opt. Communications*, 100(1-4), 1993.
- [120] L. Arnaud. *Diffraction et diffusion de la lumière : modélisation tridimensionnelle et application à la métrologie de la microélectronique et aux techniques d'imagerie sélective en milieu diffusant*. PhD Thesis, Université Paul Cézanne, 2008.
- [121] G. Demésy, F. Zolla, A. Nicolet and M. Commandré. A versatile full-vectorial finite element model for crossed-gratings. *Optics Letters*, (Doc. ID 111094, posted 15 june 2009, in press).
- [122] R. W. Wood. On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 18 :269–275, 1902.
- [123] L. Rayleigh. Note on the remarkable case of diffraction spectra described by Prof. Wood. *Philos. Mag*, 14 :60–65, 1907.
- [124] S. Enoch, E. Popov, M. Neviere and R. Reinisch. Enhanced light transmission by hole arrays. *J. Of Optics A : Pure And Applied Optics*, 4(5) :83–87, 2002.
- [125] P. B. Catrysse, B. A. Wandell and A. E. Gamal. Comparative analysis of color architectures for image sensors. In *Proc. of SPIE : Optical Engineering*, volume 3650, pages 26–35, 1999.

- [126] P. Godard, F. Zolla and A. Nicolet. Scattering by a 2-Dimensional Doped Photonic Crystal Presenting an Optical Kerr Effect Photonic Crystal. *accepté dans COMPEL*, 2009.
- [127] J. Vaillant, A. Crocherie, F. Hirigoyen, A. Cadien and J. Pond. Uniform illumination and rigorous electromagnetic simulations applied to CMOS image sensors. *Opt. Express*, 15(9) :5494–5503, 2007.