Etude théorique et expérimentale de cavités photoniques en niobate de lithium - Application à la détection de gaz

Jean Dahdah

▶ **To cite this version:**

Jean Dahdah. Etude théorique et expérimentale de cavités photoniques en niobate de lithium - Application à la détection de gaz. Optique / photonique. Université de Franche-Comté, 2010. Français. NNT : . tel-00665911

HAL Id: tel-00665911

https://theses.hal.science/tel-00665911

Submitted on 3 Feb 2012

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.

Université de Franche-Comté

École Doctorale Sciences Physiques Pour l'Ingénieur et Microtechniques (SPIM)

Thèse de Doctorat

Spécialité Optique et photonique

présentée par

Jean Dahdah

Etude théorique et expérimentale de cavités photoniques en niobate de lithium - Application à la détection de gaz

Thèse dirigée par N. Courjal et F. I. Baida

Thèse soutenue le 8 Décembre 2010

Jury :

Président :	H. MAILLOTTE	Directeur de recherche CNRS, Institut FEMTO-ST
Rapporteurs :	F. DE FORNEL	Directeur de recherche CNRS, Institut Carnot de Bourgogne
	J. P. VIGNERON	Professeur, Facultés Universitaires Notre-Dame de la paix, Namur, Belgique
Examinateurs :	X. LETARTRE	Directeur de recherche CNRS, Ecole Centrale de Lyon
	J. HAUDEN	Responsable R&D à PHOTLINE Technologies
	F. BAIDA	Professeur à l'Université de Franche-Comté
	N. COURJAL	Maître de conférences à l'Université de Franche-Comté

Remerciements

Ces travaux ont été menés au sein du Département d'optique P.M. Dufieux de l'Institut FEMTO-ST.

Je voudrais témoigner de ma gratitude envers les nombreux membres du jury qui ont bien voulu examiner ce mémoire :

Mme. Frédérique De Fornel, Directeur de recherche CNRS à l'Institut Carnot de Bourgogne ainsi que M. Jean-Pol Vigneron, Professeur à la Faculté Universitaire Notre-Dame de la Paix Belgique, pour m'avoir fait l'honneur de rapporter cette thèse ; M. Xavier Letartre, Directeur de Recherche CNRS à l'École Centrale de Lyon et M. Jérôme Hauden, Responsable R&D à Photline Technologies, pour avoir bien voulu examiner ces travaux ; M. Hervé Maillotte, Directeur de Recherche CNRS à FEMTO-ST pour avoir consacré une partie de son temps à la présidence de ce jury.

Enfin, je terminerai cette liste en remerciant très, très vivement mes encadrants : en premier lieu Nadège Courjal, maître de conférences à l'université de Franche-Comté, pour pouvoir m'acceuillir au début en stage de Master en 2007 et après en thèse. Ta disponibilité et tes conseils m'ont guidé tout au long de cette thèse. Je te suis très reconnaissant de m'avoir proposé et posé ce sujet mais surtout pour l'avoir porté pendant ces trois années.

En second lieu, je tiens à exprimer mes grandes reconnaissances et remerciements à Fadi Baida, professeur à l'université de Franche-Comté et directeur de cette thèse, pour ta disponibilité et pour avoir toujours trouvé le temps de répondre à mes questions (même avec l'encadrement de huits thésards à part moi même). J'ai eu la chance de bénéficier de tes compétences théoriques et physiques au sens large et je te remercie très sincèrement

pour m'avoir suffisament fait confiance pour me laisser presque libre dans mes simulations et orientations.

Pour tout ça, et pour mille autres choses, je garderai un excellent souvenir de votre encadrement et de mon passage dans votre équipe.

Ensuite cette thèse n'aurait jamais pu être menée à bien sans le soutien, la grande compétence et la disponibilité des membres de la centrale technologique MIMENTO. Merci donc à Gwenn (spécialiste niobate de lithium) pour les moments qu'on a passé au FIB pour la gravure soit des réseaux soit des cavités, Ludo pour tes précieux gestes de 8, Blandine (découpe à la scie), Roland (E-Beam).

En plus, des forts remerciements à Photline technologies pour les précieux guides optique. Un très grand merci pour Maria-pilar Bernal pour l'aide et le soutien en salle de manip pour réussir les caractérisations en champ proche des cavités et pour les bonnes résultats obtenus.

Je remercie toutes les personnes du département d'optique, en particulier celles de l'équipe Nano-Optique, pour leur aide, leurs discussions, leur soutien dans les instants pénibles et pour tous les bons moments que nous avons pu partager. Citons ici dans un ordre tout à fait aléatoire : Maria (Chef d'équipe), Daniel Van Labeke, Daniel Courjon, Daniel Charraut, Thierry, Michel, Jérôme, Philippe...

Je remercie fortement les thésards du département d'optique et surtout de l'équipe Nano-Optique, avec eux j'ai passé les meilleurs et les mauvais (même s'il y en pas assez) moments de la thèse... Je n'oublie jamais Abdou (mon meilleur co-équipier de Foot), Benattou (Papa), Mathieu, Hui Hui, julien, Abdoulai (Abdelhai), Ouiza, Saïd.

Finalement, un énorme Merci à ma famille : mes parents pour leur soutien, mes adorables frères et sœurs, probablement les plus chouettes du monde à qui je fais plein de bisous.

Enfin, les mots de remerciements ne sont pas assez grands, ni forts pour exprimer ce que m'apporte ELSIE en terme de joie et de réconfort. Que tu saches à quel point je t'aime...

Table des matières

Introduction **1**

1 Nanostructures : motivations, état de l'art, applications aux capteurs **5**

1.1 Historique et définitions 5

1.2 Structure de bande et bande interdite photonique 9

1.3 Les cristaux photoniques bidimensionnels 11

1.3.1 Types de structures 12

1.3.2 Diagramme de bandes et carte des bandes interdites 14

1.4 Les cavités photoniques 17

1.5 Etat de l'art sur les cavités photoniques 20

1.5.1 Les Matériaux pour la photonique 21

1.5.2 Cavités photoniques : Recherches et applications 22

1.6 Cavités photoniques et applications à la détection des molécules biochimiques et des gaz 24

1.7 Objectifs et originalités 28

1.7.1 Aspect théorique 31

1.7.2 Aspect Expérimental 32

1.8 Conclusion 32

2 Etude théorique et simulations numériques **33**

2.1 Equations de Maxwell 34

2.2 Méthode des ondes planes 35

2.2.1 Théorème de Floquet-Bloch 36

2.2.2 Calcul des coefficients de Fourier 39

2.3 Cristaux photoniques avec défauts : Méthode des Supercell 46
2.4 Méthode des différences finies dans le domaine temporel : FDTD 49
2.4.1 Algorithme de la méthode FDTD 49
2.4.2 Modèle de dispersion de Lorentz dans la FDTD 54
2.4.3 Illustration de la FDTD dans le cas 2D 55
2.5 Conclusion 58

3 Cavité photonique pour la détection des gaz 61
3.1 Le niobate de lithium dopé oxyde de magnésium - MgO :LiNbO3 62
3.2 La porphyrine 64
3.3 La cavité SHD - Etude en PWE 66
3.4 Etude de la couche de porphyrine - Modèle de Lorentz 71
3.5 La cavité SHD - Etude en FDTD 72
3.6 Conclusion 77

4 Cavités photoniques : Etude théorique et expérimentale 79
4.1 Le niobate de lithium : Généralités et guides d'onde 80
4.1.1 Propriétés 80
4.1.2 Les guides d'ondes sur $LiNbO_3$ 81
4.2 Fabrication des cristaux photoniques 86
4.2.1 Gravure par faisceau d'ions focalisés 88
4.3 Etude des microcavités SHD et H_1 90
4.3.1 Cavités SHD 92
4.3.2 Cavités H1 95
4.4 Etude expérimentale des cavités 99
4.4.1 Etude en transmission des cavités 99
4.4.2 Etude en réflexion + transmission des cavités 104
4.5 Caractérisation optique en champ proche 107
4.5.1 Présentation de la configuration expérimentale 110
4.5.2 Résultats expérimentaux 111
4.6 Conclusion 116

Conclusion 119

Bibliographie **125**

A Publications et Communications **135**

A.1 Publications 135

A.2 Communications 138

Introduction

Pendant la lecture de cette introduction, le cristallin de votre œil collecte la lumière émise par les différents caractères du texte et la concentre sur votre rétine. Cette dernière transforme la lumière reçue en impulsions électriques qu'elle envoie jusqu'au cerveau. Votre rétine réalise ainsi une fonction élémentaire : la conversion d'un signal optique en signal électrique. La rétine joue alors le rôle d'une sonde dans notre capteur de vision, l'œil. Cet exemple montre à la fois l'importance, l'intérêt et l'omniprésence des capteurs optiques dans notre quotidien.

Beaucoup de capteurs développés de nos jours reposent sur des technologies à base de semi-conducteur. Entre métaux et isolants, ces matériaux présentent des bandes d'énergie interdites pour les électrons qui permettent de contrôler la transmission de signaux électriques. L'analogue des semi-conducteurs pour l'optique intégrée a été proposé en 1987 par E. Yablonovitch sous la forme de cristaux photoniques. Les cristaux photoniques sont des structures dont l'indice de réfraction varie périodiquement dans une, deux ou trois dimensions. Ce milieu périodique produit sur la lumière qui se propage dans le cristal photonique un effet analogue à celui du potentiel périodique sur les électrons dans un cristal. De même qu'il existe pour des électrons des bandes d'énergie permises et des bandes interdites, il existe des bandes photoniques d'états permises et des bandes photoniques interdites.

Dans un premier temps, c'est la présence d'une bande interdite photonique (BIP) qui a suscité le plus d'intérêt. En effet, comme en micro électronique, l'insertion de défauts

localisés dans le cristal crée des niveaux d'énergie permis dans la BIP. Ces défauts peuvent être des cavités résonantes, des guides d'ondes ou des structures plus complexes. Cette configuration permet de piéger les photons dans des surfaces très petites induisant des volumes de modes très faibles. Cette particularité des cavités photoniques augment le temps de vie des photons permettant ainsi une forte interaction lumière-matière. Les dimensions du cristal permettent en particulier de réaliser des cavités de petites tailles avec des facteurs de qualité Q importants et donc un rapport $\frac{Q}{V}$ suffisamment grand.

Certaines espèces animales et minérales fabriquent et utilisent ces structures à des fins esthétiques et stratégiques. Ces cristaux photoniques offrent la possibilité de contrôler la propagation de la lumière et ceci, sur la dimension de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde dans le matériau et c'est notamment cette propriété qui les rend intéressants pour de nombreuses applications. Aujourd'hui, les cavités photoniques se présentent comme une des solutions envisagées pour l'application des cristaux photoniques dans le domaine des capteurs.

Dans cette thèse deux buts sont à atteindre. Le premier est d'étudier une cavité photonique pour des applications en tant que capteur de gaz. Plus précisément, nous cherchons une structure photonique fonctionnalisée par une couche sensible et spécifique qui interagit avec le gaz à détecter. Cette structure est basée sur une cavité photonique présentant la particularité d'exploiter un pic de résonance coïncidant avec un pic d'absorption de la couche sensible. Le deuxième but, est de démontrer la faisabilité de cavités photoniques sur niobate de lithium, un matériau présentant des propriétés très intéressantes pour les applications micro-nanophotoniques.

Dans le premier chapitre, les concepts de base sur les cristaux photoniques seront présentés. Pour cela, un rappel sur les cristaux photoniques et leurs propriétés sera détaillé. Ce chapitre sera l'occasion de montrer l'état de l'art et les matériaux associés aux cavités photoniques jusqu'ici. Nous ciblerons particulièrement les applications dédiées à la détec-

tion des gaz et des biomolécules. Ce chapitre se terminera par la présentation de mon sujet de thèse et de ses particularités.

Nous détaillerons dans le deuxième chapitre les deux méthodes théoriques utilisées dans cette thèse. La première est la méthode des ondes planes basées sur une résolution des équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel et qui nécessite l'utilisation du théorème de Bloch dans un cristal périodique. Avec les modifications ramenées à cette méthode nous déterminerons les structures de bandes correspondant à des cristaux photoniques à motifs annulaires, composés de trois milieux différents. La deuxième est la méthode des différences finies dans le domaine temporel basée sur la résolution des équations de Maxwell dans le domaine temporel avec l'algorithme de Yee. Pour éviter les réflexions des ondes par les bords de la fenêtre de calcul, la méthode des couches absorbantes développée par Bérenger est intégrée au code. Le comportement dispersif des couches sensible est pris en compte à travers un modèle de Lorentz qui permet d'étudier les variations de l'absorption de la couche suite à l'adsorption d'un gaz spécifique.

Nous développerons, dans le troisième chapitre, l'étude complète d'une cavité photonique en MgO :$LiNbO_3$ recouverte d'une couche sensible de porphyrine pour la détection du benzène. La cavité photonique présente un pic de résonance qui coïncide avec le pic d'absorption de la couche de porphyrine. Nous déterminerons la sensibilité de la cavité à la variation de l'épaisseur de la couche de porphyrine, ainsi que la sensibilité à la variation de la concentration du benzène dans le milieu.

Le quatrième chapitre se base sur les procédés de fabrication des guides d'ondes, des cristaux photoniques et sur les résultats expérimentaux. Une étude de l'influence des paramètres géométriques des cavités sur la transmission et sur la réflexion sera proposée afin d'avoir la meilleure compréhension possible de la résonance d'une cavité photonique en optique guidée. Ainsi, les résultats expérimentaux obtenus en transmission sont montrés mettant en évidence la présence d'une bande interdite photonique. Une autre étude ex-

périmentale en réflexion sera présentée. Les tests en champ proche sont montrés dans la dernière partie de ce chapitre montrant, pour la première fois, une cavité résonante réalisée sur niobate du lithium.

Enfin, nous donnerons une conclusion du travail réalisé durant cette thèse et nous proposerons des perspectives tournées vers les applications possibles des cavités photoniques en niobate de lithium. L'impact de la largeur du guide optique et de la structuration de la cavité sur la position du pic de résonance en transmission n'est pas négligeable et sera notamment expliquée.

Chapitre 1

Nanostructures : motivations, état de l'art, applications aux capteurs

Ce chapitre est une introduction à l'univers des cristaux photoniques. Dans les trois premières parties nous introduisons la notion du cristal photonique, et nous discuterons des notions de base telles les bandes interdites, la structure de bande, et les différentes mailles des cristaux photoniques bidimensionnels. Ensuite, une partie sera consacrée à l'étude des cavités photoniques, leurs propriétés et intérêts, et leurs applications dans les différents domaines. L'application des cavités photoniques pour la détection des biomolécules et des gaz, sera développée dans la sixième partie de ce chapitre. Dans la dernière partie, nous décrirons les objectifs et les originalités de notre travail.

1.1 Historique et définitions

Depuis la réalisation du premier transistor [1] en 1947, les semi-conducteurs ont fait l'objet de nombreuses recherches et études. La figure 1.1 (a), illustre le progrès spectaculaire réalisés dans le domaine des semi-conducteurs, en comparant le premier transistor réalisé expérimentalement par Bardeen, Brittain et Shockley en 1947 [1], et le microprocesseur In-

tel Xeon Core Quad constitué de 2.3 milliards de transistors dans une surface de quelques mm^2. Une des propriétés des semi-conducteurs, la plus intéressante et la plus importante, est l'existence d'une structure de bande pour les électrons et les trous. Cette structure de bande décrit le comportement des électrons/trous dans un cristal semi-conducteur en déterminant les états d'énergies permises et/ou interdites. La gamme d'énergies non permises forme la " bande interdite " située entre la bande de valence et la bande de conduction.

Existe-t-il un matériau analogue pour les photons à ces cristaux semi-conducteurs pour les électrons ? En comparant les équations de Maxwell pour les photons dans un milieu homogène, isotrope, non magnétique et en l'absence de charges avec l'équation de Schrodinger qui régit le comportement des électrons, on peut remarquer que la permittivité électrique du milieu joue le même rôle que le potentiel atomique périodique que subissent les électrons. Ainsi, dans un matériau qui présente une distribution périodique de la constante diélectrique et sous certaines conditions, il est possible d'obtenir des bandes interdites pour les photons. Ce sont ces matériaux que nous appellerons des cristaux photoniques ou matériaux à bande interdite photonique.

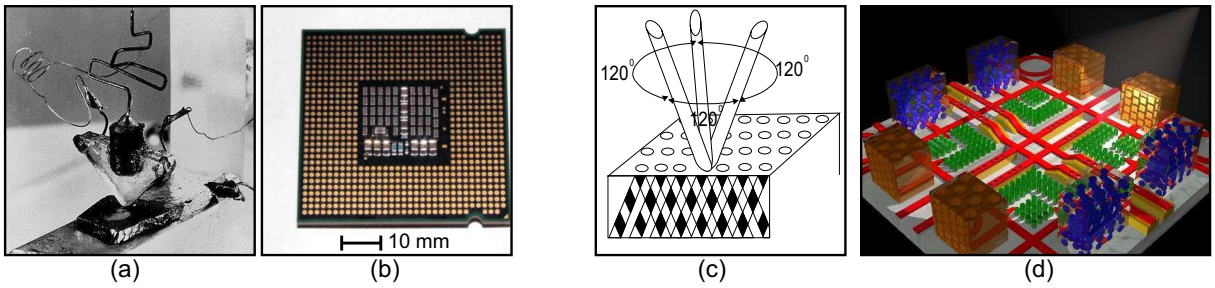


Fig. 1.1 – Développement de la microélectronique où (a) correspond au premier transistor réalisé par Shockley et al [1] et (b) le microprocesseur intel contenant 2.3 milliards de transistor. Développement de nanophotonique où (c) représente une vue schématique d'un cristal photonique 3D [2] de taille micrométrique et (d) le futur micropolis photonique imaginé par Joannopoulos [3].

L'idée d'une bande interdite photonique revient à Lord Rayleigh qui, en 1887, publia dans *Philosophical Magazine* un papier dans lequel il étudie la propagation de la lumière dans des structures périodiques infinies [13]. Ainsi, Rayleigh a compris qu'une structure multicouche peut produire une bande interdite et permet d'obtenir un miroir avec de forts

coefficients de réflexion [14]. Dès le début du 20ème siècle, William Lawrence Bragg réalisa une structure multicouche formée d'une modulation périodique de l'indice de réfraction. Avec une telle structure il obtint une réflexion de plus de 99% et qui porte désormais son nom, le miroir de Bragg. Ainsi étaient nées les structures 1D (unidimensionnelles) à bande interdite photonique (Figure 1.2).

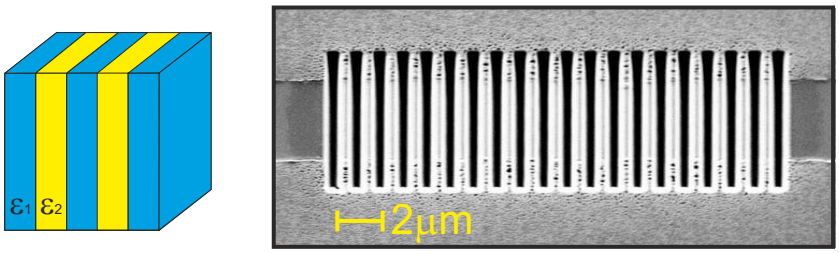


FIG. 1.2 – (a) Structure photonique 1D. (b) Exemple d'un réseau de Bragg réalisé sur un substrat de niobate de lithium avec une période de 1058 *nm* réalisé à la centrale technologique MIMENTO de l'institut FEMTO-ST à Besançon.

L'idée des cristaux photoniques (CP) a été introduite dans la communauté scientifique par John [15] et Yablonovitch [16] en 1987, en étudiant le contrôle de l'émission spontanée dans les émetteurs semi-conducteurs. Depuis ce temps, les études sur les CPs sont devenues un thème de recherche en continuelle croissance. La figure 1.1 (b) illustre le développement des cristaux photoniques en comparant le schéma du premier cristal photonique réalisé expérimentalement [16] avec l'architecture envisagée pour l'avenir par Joannopoulos, le " Micropolis Photonique " [3], analogue photonique du microprocesseur. Depuis 1987, les cristaux photoniques sont devenus un sujet de recherche très promoteur, entraînant des développements dans leurs fabrications, ainsi que dans la théorie et les applications. On peut trouver des livres [3,17,18], des éditions spéciales de journaux [19,20], et des centaines de publications sur les cristaux photoniques chaque année. La figure 1.3 nous montre le nombre d'articles publiés sur les CPs depuis leur naissance en 1987 jusqu'à nos jours [21]. La question qui se pose est que désigne-t-on sous l'appellation "cristal photonique" ?

On définit un cristal photonique comme une structure constituée d'un arrangement périodique de différents indices de réfraction suivant une, deux (voir figure 1.4 (a)) ou

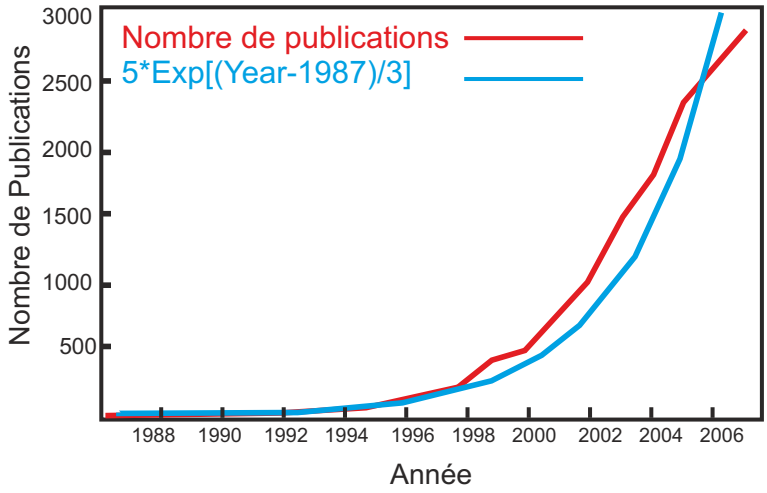


Fig. 1.3 – Croissance du nombre de publication sur les cristaux photoniques depuis 1987 jusqu'à 2008.

trois (voir figure 1.5 (c) et (d)) directions de l'espace, avec un fort contraste d'indice de réfraction. Une autre condition est que la période caractéristique du CP soit comparable à la longueur d'onde de travail. La conséquence de cette périodicité se manifeste dans la structure de bande photonique, où certaines fréquences sont permises suivant certaines directions mais interdites suivant d'autres directions. La gamme des fréquences interdites pour les photons suivant une direction forme la bande interdite photonique (BIP) que l'on a eu l'occasion d'évoquer précédemment pour les miroirs multicouches. Similaire à la structure de bande dans les semi-conducteurs, la structure de bande photonique régit la propagation de la lumière dans les cristaux photoniques en reliant la fréquence ω au vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ des photons. Pour déterminer la structure de bande photonique, plusieurs méthodes numériques et analytiques sont développées et seront décrites dans le chapitre 2.

Comme nous le verrons par la suite, l'existence d'une bande interdite photonique n'est pas la seule propriété intéressante des CPs. La dispersion bien particulière de la lumière dans ces matériaux permet d'envisager d'autres fonctions comme par exemple le piégeage de la lumière, les structures guidantes et bien sûr diverses applications comme par exemple les capteurs.

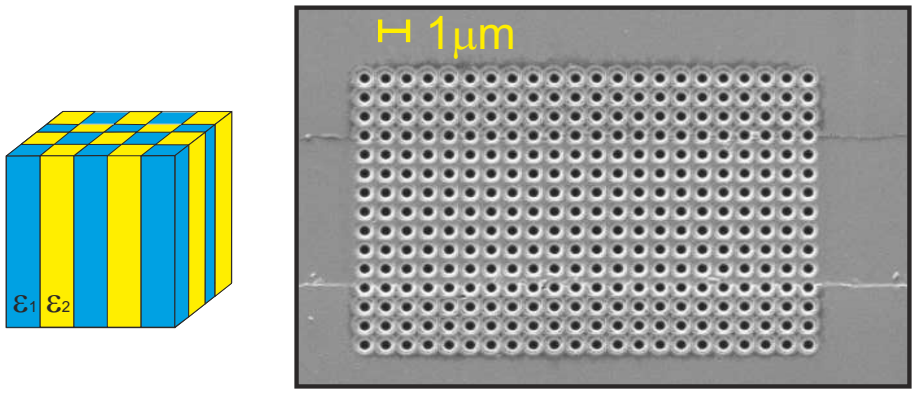


Fig. 1.4 – (a) Cristal photonique 2D. (b) Matrice de trous d'air réalisée sur un substrat de niobate de lithium avec une période a=825nm et un rayon r=206nm et fabriqué à la centrale technologique MIMENTO de l'institut FEMTO-ST.

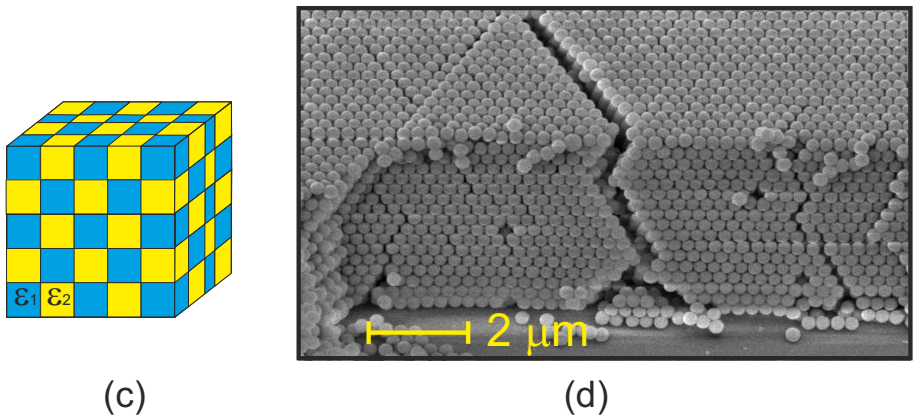


Fig. 1.5 – (a) Cristal photonique 3D. (b) Image MEB d'un cristal photonique colloidal obtenu par des sphères de diamètres 305nm [4].

1.2 Structure de bande et bande interdite photonique

De façon générale, les équations de Maxwell décrivent la propagation des ondes électromagnétiques dans un milieu de constante diélectrique $\varepsilon(r)$. Les équations aux valeurs propres obtenues pour les champs électrique et magnétique sont données dans les équations 1.1 et 1.2 qui seront traitées dans le chapitre suivant. Dans le cas d'un cristal photonique où la constante diélectrique est périodique, les équations 1.1 et 1.2 sont analogues à l'équation de Schrödinger 1.3 décrivant le déplacement des électrons dans un potentiel périodique, où

$\overrightarrow{H}$ est analogue à la fonction d'onde $\psi(r)$ et $\varepsilon(r)$ est analogue au potentiel ionique V(r).

$$\frac{1}{\varepsilon(\overrightarrow{r})}\overrightarrow{\nabla}\wedge\{\overrightarrow{\nabla}\wedge\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r})\}=\frac{\omega^2}{c^2}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}) \tag{1.1}$$

$$\overrightarrow{\nabla}\wedge\{\frac{1}{\varepsilon(\overrightarrow{r})}\overrightarrow{\nabla}\wedge\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r})\}=\frac{\omega^2}{c^2}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}) \tag{1.2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(r,t)+V(r,t)\psi(r,t)=\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) \tag{1.3}$$

Cette analogie avec la physique du solide permet de réutiliser tous les outils de la cristallographie liés à la périodicité du réseau. L'opérateur correspondant à l'équation 1.1 (ou 1.2) est hermitien et commute avec les opérateurs de translation du réseau cristallin. D'après le théorème de Bloch, les solutions sont de la forme $\mathrm{H}_k(\mathrm{r})=\mathrm{u}_k(\mathrm{r})*\exp^{ik.r}$. L'équation est à résoudre pour chaque vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ appartenant à la première zone de Brillouin du réseau réciproque, et revient à résoudre un système d'équations aux valeurs propres, où ω est valeur propre et H_k est le vecteur propre associé. En réalité, il n'est pas nécessaire de réaliser le calcul dans toutes les directions du plan ou de l'espace car les extremums des bandes se situent le long des directions de symétrie de la première zone de Brillouin. L'ensemble des solutions discrètes de ω donne la structure de bande $\omega(\mathrm{k})$ du cristal photonique. Quand les vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}$ parcourent la zone de Brillouin, les bandes $\omega(\mathrm{k})$ recouvrent le spectre entier d'énergie. Toutefois, dans certaines conditions, il existe des intervalles d'énergie où aucune bande $\omega(\mathrm{k})$ n'est disponible : ce sont les bandes interdites photoniques. Lorsque la bande interdite est étendue à toutes les directions de la zone de Brillouin et pour tous les états de polarisations, elle sera appelée bande interdite complète. La notion de bande interdite est omniprésente dans le monde des cristaux photoniques, et la majorité des applications découlent de ses propriétés.

Cette analogie est la même pour les différents types de cristal photonique 1D, 2D et 3D. La figure 1.6 illustre un exemple de structure de bande pour un CP-1D constitué de

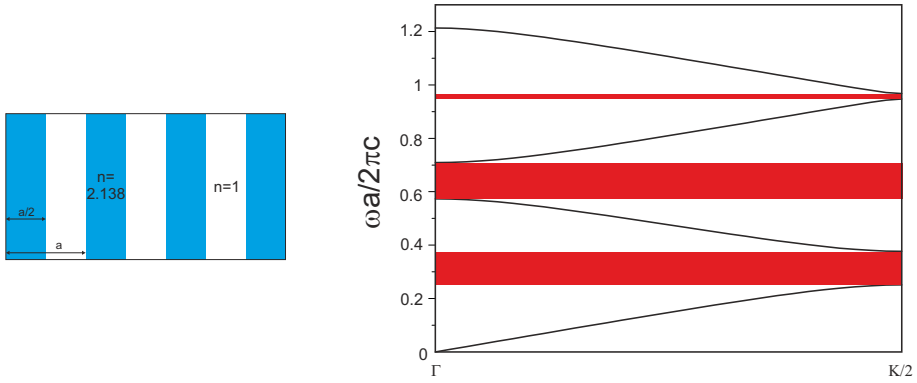


Fig. 1.6 – Structure de bande d'un réseau de Bragg constitué d'une multicouche d'air et de niobate.

multicouche d'air (n=1) et de niobate de lithium (n=2.138). Dans ce qui suit nous nous intéressons plutôt à l'étude des CP bidimensionnels.

1.3 Les cristaux photoniques bidimensionnels

Les cristaux photoniques 2D ont été à la base du développement récent de la Micro-Nano-Photonique, car ils sont plus accessibles, du point de vue fabrication, que les CP-3D initialement introduits par E. Yablonovitch [16] en 1987. Les outils de fabrication, déjà bien rodés car issus de la microélectronique, nous permettent de réaliser des structures 2D avec des tailles submicrométriques.

Dans le cas d'un matériau diélectrique, on définit le cristal photonique 2D par sa constante diélectrique : $\varepsilon(\overrightarrow{r}) = \varepsilon(\overrightarrow{r} + m\overrightarrow{a_1} + n\overrightarrow{a_2})$, où $\overrightarrow{r}$ est le vecteur position dépendant des deux directions de l'espace, m et n sont des entiers et $\overrightarrow{a_1}$ et $\overrightarrow{a_2}$ sont les vecteurs de base de la structure cristalline formant le cristal photonique. Cette écriture reflète la périodicité de la constante diélectrique et nous permettra (chapitre 2) de modéliser nos structures particulières.

La formation des bandes interdites photoniques est le résultat de multiple phénomènes

de diffraction cohérente engendrée par la structuration 2D. Deux types existent : la diffraction de Bragg et la diffusion de Mie. L'union entre les deux mécanismes produit les bandes interdites photoniques. Dans le CP-2D, les paramètres ci-dessous, ont une influence sur les deux phénomènes de diffraction :

- La géométrie de la maille.
- Le choix des motifs qui forment le CP, et le choix du substrat : Le contraste d'indice de réfraction doit être suffisamment élevé.
- La forme et la dimension des cellules périodiques, qu'affecte la section efficace de la diffusion de Mie.

Le contrôle de ces paramètres permet donc un contrôle des bandes interdites photoniques, qui peut être exploité pour des applications diverses, dont les capteurs.

1.3.1 Types de structures

Tout comme en cristallographie, le motif peut être quelconque (cylindre à section circulaire, carré, rectangulaire...) et il existe plusieurs types de mailles élémentaires. Un concept fondamental dans la description d'une structure cristalline est celle du réseau de Bravais qui décrit la répartition périodique avec laquelle sont arrangées les motifs. Dans le plan, il existe 5 types de réseaux de Bravais. Quatres réseaux particuliers (carré, rectangulaire, rectangulaire centré et hexagonal) et le réseau général (oblique).

Une autre classification que nous pouvons faire, consiste à diviser les mailles en deux types :

- La maille orthogonale, où les vecteurs de bases sont orthogonaux, comme exemple la maille carrée (Figure 1.7).
- La maille oblique, où les vecteurs de bases ne sont pas perpendiculaires et généralement l'angle entre les deux vecteurs est de 60^0. Dans ce système oblique il existe plusieurs exemples : La maille triangulaire (figure 1.8), la maille en nid d'abeille ou Honeycomb (Figure 1.9(a)) et la maille Kagome (Figure 1.9(b)).

Dans les trois figures montrées ci-dessous, le réseau réciproque est le même pour les trois types de mailles obliques, et ils possèdent la même zone irréductible de Brillouin.

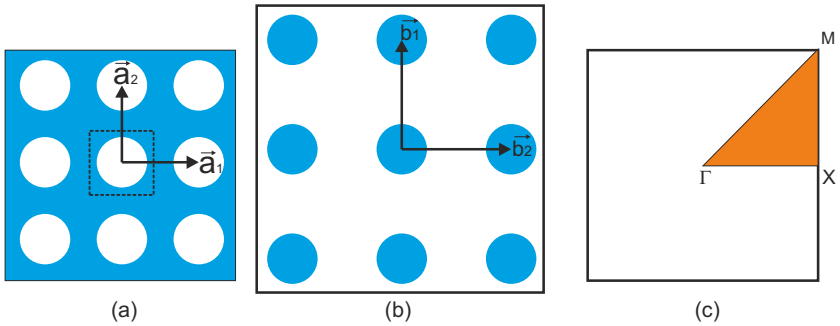


Fig. 1.7 – (a) Maille carrée avec la cellule unité et les vecteurs de bases. (b) Le réseau réciproque de la maille carré avec les vecteurs de bases b_1 et b_2. (c) La zone irréductible de Brillouin.

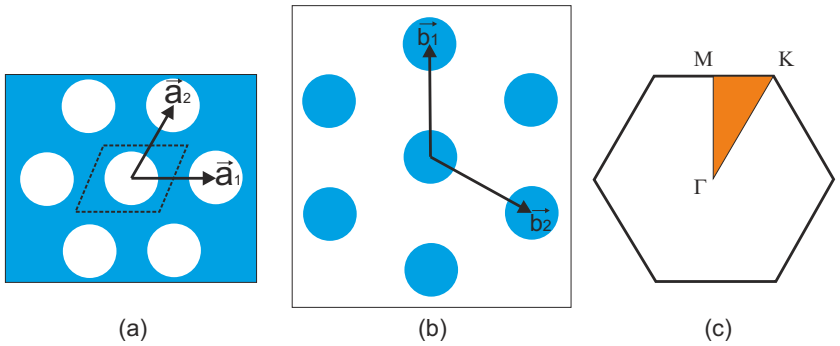


Fig. 1.8 – (a) Maille triangulaire avec la cellule unité et les vecteurs de bases. (b) Le réseau réciproque de la maille triangulaire avec les vecteurs de bases b_1 et b_2. (c) La zone irréductible de Brillouin.

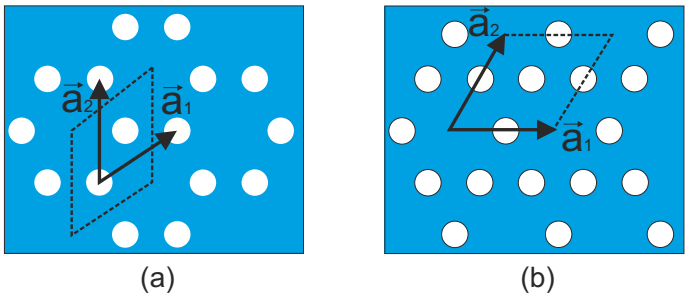


Fig. 1.9 – (a) Maille à nid d'abeille. (b) Maille Kagome.

Le réseau est décrit par les deux vecteurs de base du réseau direct $\overrightarrow{a}_1$ et $\overrightarrow{a}_2$. Les vecteurs du réseau réciproque, $\overrightarrow{b}_1$ et $\overrightarrow{b}_2$, sont déduits de $\overrightarrow{a}_1$ et $\overrightarrow{a}_2$ en utilisant les expressions

suivantes :

$$\overrightarrow{b}_1 = 2\pi \frac{\overrightarrow{a}_2 \wedge \overrightarrow{a}_3}{\overrightarrow{a}_1 \cdot (\overrightarrow{a}_2 \wedge \overrightarrow{a}_3)} \tag{1.4}$$

$$\overrightarrow{b}_2 = 2\pi \frac{\overrightarrow{a}_3 \wedge \overrightarrow{a}_1}{\overrightarrow{a}_1 \cdot (\overrightarrow{a}_2 \wedge a_3)} \tag{1.5}$$

$$\overrightarrow{b}_3 = 2\pi \frac{\overrightarrow{a}_1 \wedge \overrightarrow{a}_2}{\overrightarrow{a}_1 \cdot (\overrightarrow{a}_2 \wedge \overrightarrow{a}_3)} \tag{1.6}$$

où $\overrightarrow{a}_3 = \widehat{e}_z$ ($\widehat{e}_z$= vecteur unitaire dans la direction z). La période du cristal photonique est notée $\boldsymbol{a}$. Le facteur de remplissage, noté *f*, désigne le rapport entre l'aire du motif (ici un disque : πR^2, où R est le rayon du disque) et l'aire de la cellule élémentaire du réseau. Les propriétés élémentaires des réseaux carré et triangulaire sont résumées dans le tableau 1.1.

Réseau	Vecteurs directs	Vecteurs réciproques	Facteur de remplissage
Carré	$\overrightarrow{a}_1 = (a, 0),\ \overrightarrow{a}_2 = (0, a)$	$\overrightarrow{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0),\ \overrightarrow{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$	$f = \frac{\pi R^2}{a^2}$
Triangulaire	$\overrightarrow{a}_1 = (a, 0),\ \overrightarrow{a}_2 = (\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2})$	$\overrightarrow{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, -\frac{\sqrt{3}}{3}),\ \overrightarrow{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, \frac{2\sqrt{3}}{3})$	$f = \frac{2\pi R^2}{\sqrt{3}a^2}$

TAB. 1.1 – Propriétés élémentaires d'un réseau à maille carrée et d'un réseau à maille triangulaire.

1.3.2 Diagramme de bandes et carte des bandes interdites

Le réseau utilisé dans notre travail est un réseau triangulaire de trous d'air gravé dans un milieu matériel. Ce réseau permet d'ouvrir les plus larges bandes interdites. L'étude des différents cas montre que la structure triangulaire de trous d'air permet l'ouverture d'une large bande interdite photonique en polarisation transverse magnétique (dite TM), pour laquelle le champ magnétique est parallèle à l'axe des trous. Ainsi, c'est cette structure qui

est utilisée dans la littérature pour la plupart des applications en CP-2D et c'est celle-ci que nous utiliserons dans notre travail.

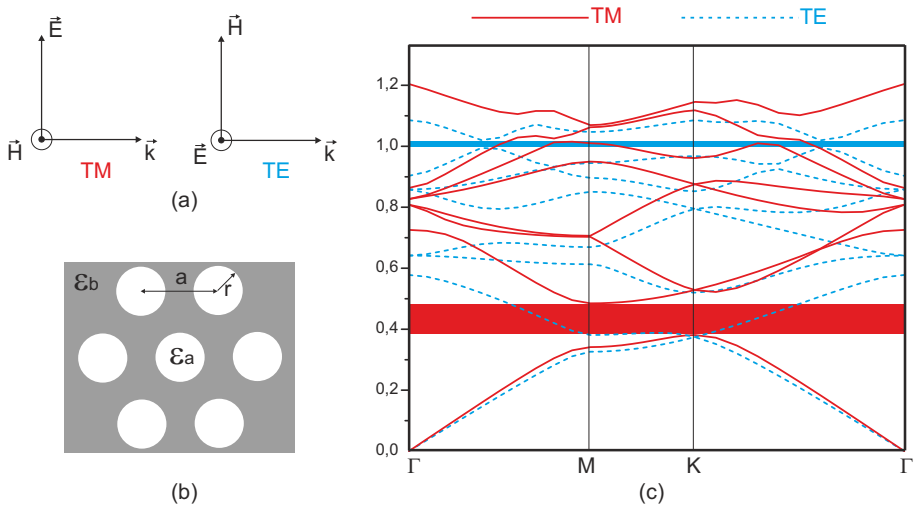


Fig. 1.10 – (a) Directions des champs suivant la polarisation (c) Structure de bande d'un réseau triangulaire constitué de trous d'air ($\varepsilon_a = 1$) de rayon r=0.4a, dans un substrat de niobate de lithium ($\varepsilon_a = 4.571$).

Un exemple de diagramme de bande pour une structure à maille triangulaire est rapporté sur la figure 1.10, dans le cas d'un CP constitué de trous d'air dans un substrat de niobate de lithium (n=2.138) avec r/a=0.4, où a est la période du CP. Le calcul est fait le long des axes de haute symétrie de la première zone de Brillouin, sur le contour $\Gamma - M - K - \Gamma$, en utilisant la méthode des ondes planes qui sera décrite dans le chapitre 2. Ici, ce n'est pas la fréquence qui est représentée mais la fréquence normalisée ($\frac{\omega a}{2\pi c}$), un facteur sans dimension. Le calcul du diagramme de bande nous renseigne sur la position et la largeur des bandes interdites photoniques pour les deux polarisations TE et TM : à partir du diagramme de bande, on peut visualiser l'influence de la géométrie ou de l'indice de réfraction sur la position des BIP. Le diagramme de bande est donc un outil très efficace pour déterminer des paramètres optimaux de cristal en vue d'une application ciblée.

La vitesse de phase peut être déduite du diagramme de dispersion $\omega = f(k)$, en calculant le rapport de la valeur de la fréquence ω sur la valeur de k en un point d'une bande :

$$v_p = \frac{\omega}{k} \tag{1.7}$$

La vitesse de groupe, quant à elle, est définie comme étant la tangente en un point de la courbe de dispersion et elle est exprimée par :

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \tag{1.8}$$

La vitesse de groupe de la lumière peut être considérablement réduite jusqu'à s'annuler en bord de bande interdite. Cette propriété, typique des cristaux photoniques, est particulièrement attractive pour les applications capteurs, dont la sensibilité dépend de la durée d'interaction à l'intérieur de la structure.

Deux autres paramètres peuvent être ajustés qui sont le contraste d'indice et le rapport r/a ou facteur de remplissage en air. Un exemple est donnée dans la figure 1.11, où la position et la largeur d'une BIP varie en fonction du rapport $\frac{r}{a}$ pour une structure de trous d'air, à maille triangulaire, réalisée sur substrat de $LiNbO_3$. C'est la carte de bande interdite qui est très pratique pour décider des paramètres du cristal photonique en vue d'une application.

Jusqu'à maintenant nous nous sommes intéressés à un cristal photonique parfaitement périodique. Cependant, comme dans le cas du défaut localisé dans un cristal semiconducteur qui est essentiel dans la réalisation des composants électroniques actuels, l'insertion d'un ou de plusieurs défaut dans la périodicité d'un CP parfait dévoile des nouvelles propriétés optiques très intéressantes pour les applications en optique intégrée et en micro-nano-photonique. Un attrait majeur de ces structures photoniques 2D avec défaut repose sur la réalisation des nanocavités optiques avec un grand facteur de qualité et des petits volumes de mode. Ces cavités optiques à base de cristaux photoniques ont comme appellation : les cavités photoniques. Dans la section suivante, nous décrirons les différentes types

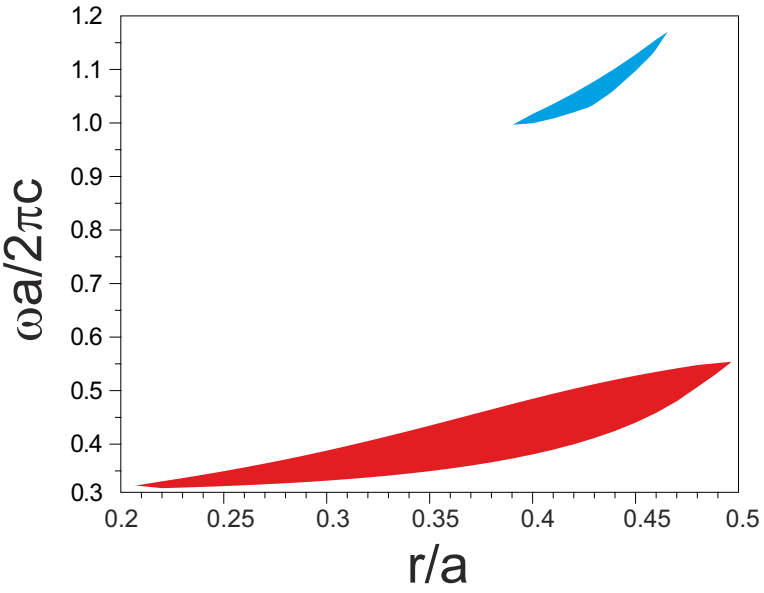


Fig. 1.11 – Carte de bande interdite pour les deux polarisations TM (rouge) et TE(bleu)

et propriétés des cavités photoniques, les modifications induites par la présence d'un défaut sur le diagramme de bande et sur la distribution du champ électromagnétique.

1.4 Les cavités photoniques

Les cavités photoniques sont basées sur l'insertion contrôlée de défauts au sein du cristal photonique lors de sa fabrication. Les géométries bidimensionnelles possibles sont quasi infinies et peuvent aller de la modification de la taille ou de l'indice d'un seul motif du cristal à des défauts plus étendus comme le retrait de rangées entières de motifs.

Une rupture locale du réseau périodique constitue un défaut se comportant comme une microcavité, susceptible de piéger ou localiser les photons dans l'espace. Cette dernière peut générer des modes propres (ou modes résonants) ayant des fréquences situées dans la bande interdite du cristal et être le support d'un champ électromagnétique propagatif pour ces fréquences. En changeant le rayon d'un seul trou, on forme une cavité pour les modes se propageant dans le CP. Ceci est similaire à la formation des puits dans un potentiel

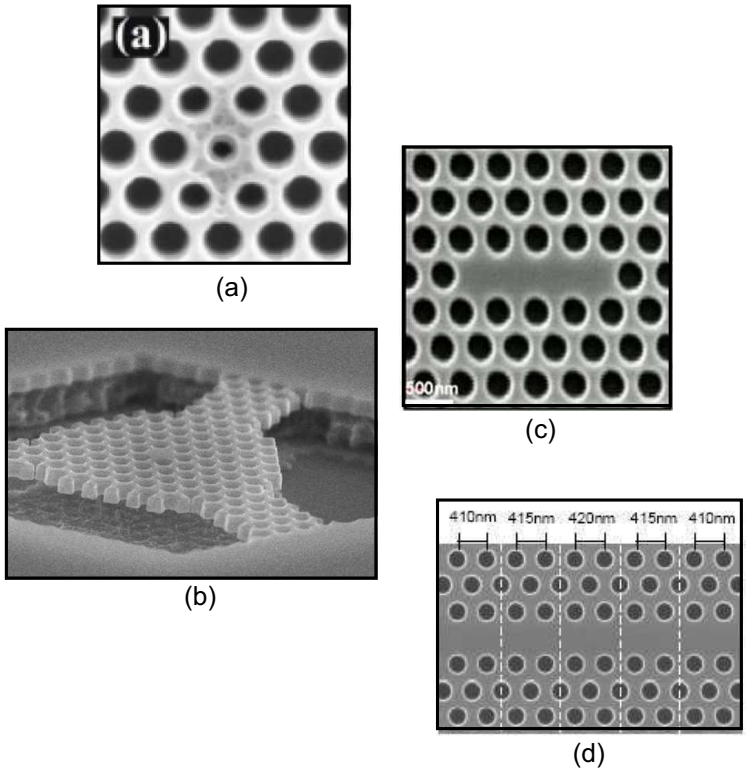


FIG. 1.12 – représentation de différentes types de cavités : (a) cavités avec défauts, (b) cavité suspendu avec un seul défaut, (c) cavités de type L4, (c) Hétérostructure ou cavité de Noda.

électrostatique périodique étudié en mécanique quantique. Une autre façon de comprendre les choses est de dire que si le rayon d'un trou d'air diminue, le facteur de remplissage en air décroît, ce qui entraîne une chute d'une ou de plusieurs bandes existantes dans la BIP, créant ainsi des niveaux de types " donneur ". Si le rayon augmente, le taux de remplissage en air croît, et ce sont des fréquences propres de la bande en dessous de la BIP qui remontent dans cette dernière créant ainsi des niveaux de types " accepteurs ". Ce concept de donneur et accepteur est similaire à celui utilisé pour les cristaux semi-conducteurs.

Il existe plusieurs types de cavités et leur nomination dépend de la modification apportée à la périodicité du cristal photonique. La cavité la plus simple à étudier est celle obtenue en modifiant le rayon d'un seul trou et qui est connue dans la littérature sous l'appellation "cavité avec un seul défaut" ou SHD pour "single hole defect". Les cavités obtenues en

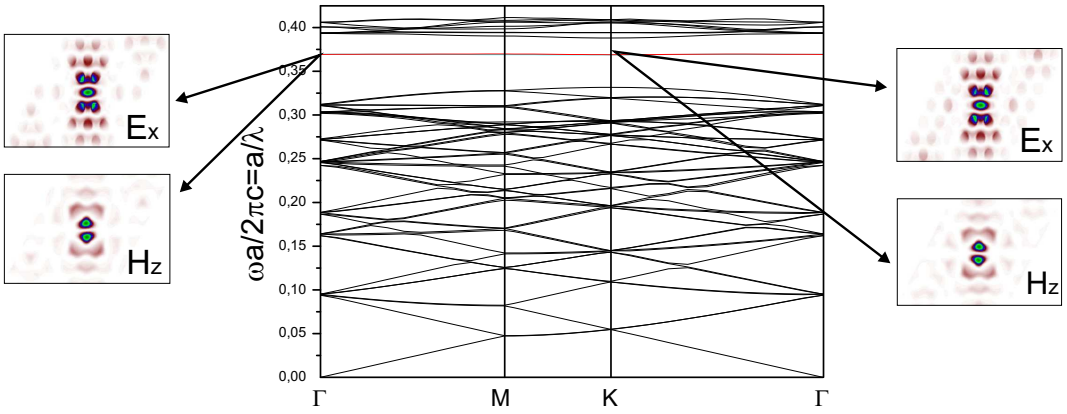


Fig. 1.13 – Diagramme de bande pour une cavité de type H1 sur un substrat de niobate de lithium avec $\frac{r}{a} = 0.4$, où l'on montre aussi la distribution des champs E_x et H_z au point de symétrie et pour une polarisation TM.

omettant un certain nombre de trous du réseau périodique triangulaire sont connues sous l'appellation "cavité de type H_n", où n est le nombre de rangées manquantes par côté de l'hexagone. Dans le cas d'une cavité de type SHD ou H_1, un seul mode de résonance apparaît dans la bande interdite photonique. Ce mode est doublement dégénéré en raison de la symétrie du CP à maille triangulaire. La figure 1.12 illustre le cas de quatre types de cavités, où (a) correspond à une cavité de type SHD réalisée sur substrat de silicium (SOI), (b) représente une cavité de type H1 sur un substrat d'arséniure de gallium (AsGa), (c) et (d) représentent, respectivement, une cavité de type L3 sur un substrat de SOI, obtenue en enlevant trois trous consécutifs de la même ligne, et une hétéro structure connue sous le nom de cavité de Noda [22] . Le calcul de la structure de bande dans le cas des cristaux photoniques ayant des défauts sera explicité dans le chapitre 2 en utilisant la méthode "supercell". La figure 1.13 illustre un exemple d'une structure de bande d'une cavité de type H_1 où le mode de cavité apparaît dans la bande interdite photonique. Un paramètre très intéressant à exploiter dans les cavités photoniques est leur facteur de qualité noté Q, qui est décrit par l'équation 1.9 où $\Delta\omega(\Delta\lambda)$ correspond à la largeur à mi-hauteur du pic du mode de résonance.

$$Q = \frac{\omega}{\Delta\omega} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \tag{1.9}$$

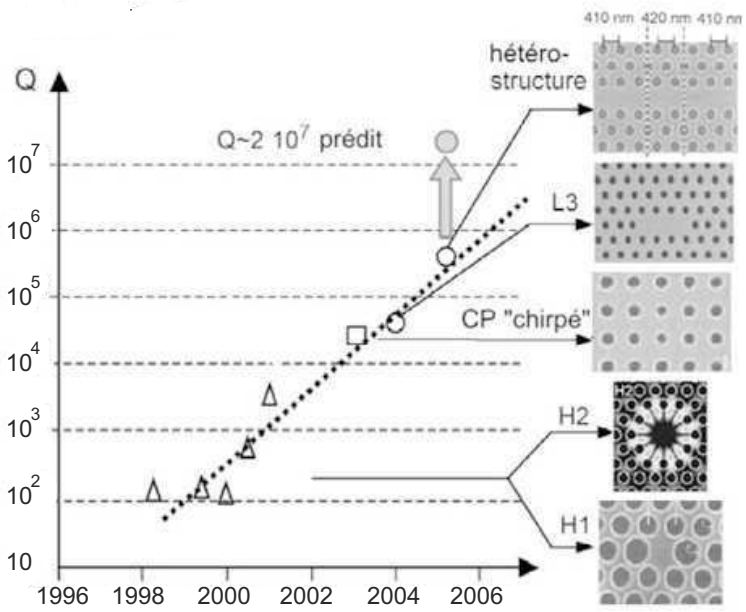


FIG. 1.14 – Le développement des cavités photoniques durant les dix dernières années avec la croissance du facteur de qualité.

Grâce au développement récent des hétéro structures photoniques (cavités de type Noda), il est possible d'atteindre des facteurs de qualités de l'ordre de 10^6 pour des volumes de modes de l'ordre de 0.07 μm^3 [23]. Ces microcavités, ayant de forts facteurs de qualités (Q) peuvent être utilisées pour confiner la lumière dans de petits volumes. Cette particularité permet une forte interaction lumière-matière, particulièrement sensible aux variations environnementales.

1.5 Etat de l'art sur les cavités photoniques

Nous nous sommes intéressés jusqu'ici à la présentation et aux propriétés théoriques des cristaux photoniques et des cavités photoniques. Dans cette partie, nous détaillerons les principaux matériaux utilisés pour la réalisation des cavités photoniques bidimensionnelles. Ensuite, nous allons rappeler la chronologie selon laquelle ils ont été introduits dans le

domaine des cristaux photoniques. La dernière partie sera consacrée à un état de l'art sur l'application des cavités photoniques 2D en tant que sonde pour la détection de gaz, plus particulièrement en liaison avec une partie du sujet de cette thèse.

1.5.1 Les Matériaux pour la photonique

Les semi-conducteurs, dès le début, ont attiré l'attention des chercheurs pour la mise en oeuvre des microcavités photoniques car ils offraient à la fois la possibilité d'obtenir un fort contraste d'indice, et d'être transparents dans les domaines du visible ou du proche infrarouge. Les plus utilisés sont les semi-conducteurs de types III-V (AsGa, InP,...) car ils présentent de bonnes propriétés optiques suite à un gap électronique direct, mais leur principal inconvénient reste leur coût. Les semi-conducteurs de type IV-IV (Si) sont, quant à eux, moins coûteux et mieux maîtrisés en terme de technologie suite au progrès de la microélectronique. A l'inverse des semi-conducteurs III-V, les semi-conducteurs de type IV-IV présentent un gap électronique indirect conduisant ainsi à des propriétés médiocres d'émission de la lumière.

L'équipe nano-optique de l'institut FEMTO-ST à Besançon a démontré la faisabilité des cristaux photoniques sur un autre type de substrat, le niobate de lithium ($LiNbO_3$) [24]. C'est d'ailleurs à Besançon qu'a été effectuée la première démonstration expérimentale d'un guide photonique sur niobate de lithium [25]. En proposant d'étudier une cavité photonique $LiNbO_3$ pour des applications capteurs, nous nous proposons ici de montrer, pour la première fois, la faisabilité de cavités photoniques $LiNbO_3$: cette fois-ci, il ne s'agit plus de développer des guides photoniques, mais des microcavités qui serviront au développement de capteurs de gaz compacts. Avant de détailler notre sujet, revenons à l'état de l'art associé aux microcavités.

1.5.2 Cavités photoniques : Recherches et applications

En 1977, Pochi Yeh et al [26] étudient pour la première fois la localisation de la lumière dans des structures 1D avec des défauts. Après la naissance des cristaux photoniques 2D et 3D en 1987, il a fallu attendre jusqu'à 1991 lorsque E. Yablonovitch et al [2, 5] montrent pour la première fois l'effet des défaut localisés dans des structures photoniques micrométriques 3D réalisées sur un substrat d'AsGa. La figure 1.15 montre la structure étudiée avec les résultats expérimentaux obtenus. Quelques années plus tard, la même équipe de recherche étudie les cavités photoniques unidimensionnelles passives en optique guidée [6, 27]. La cavité est réalisée sur un guide ridge en Si illustrée sur la figure 1.16(a) où le mode de résonance est obtenue pour $\lambda = 1560\ nm$ comme le montre la figure 1.16(b). L'apparition de ce mode de résonance est due à un effet Fabry-Pérot dans la cavité. En 1997, Labilloy et al. [28] étudient pour la première fois les cavités photoniques bidimensionnelles sur des guides d'ondes. Les cavités obtenues en incluant des défauts ponctuels dans un cristal photonique sont apparues en 1998 [29].

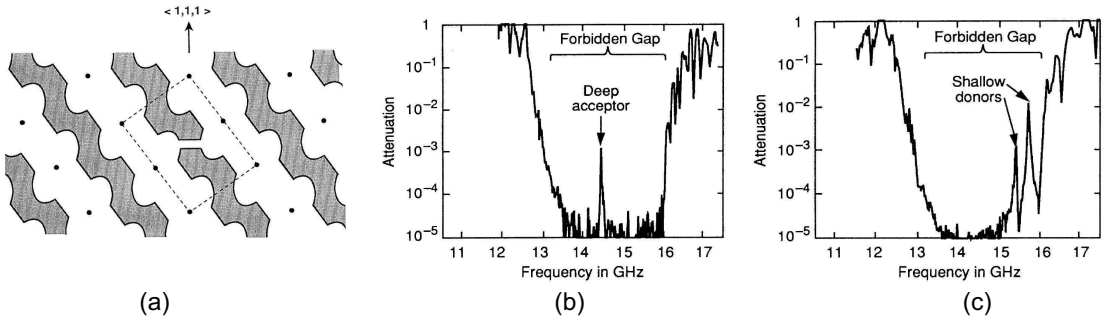


FIG. 1.15 – (a) Représentation d'une coupe de la cavité 3D étudiée dans [2, 5] et constituée de sphères d'air dans un matériau d'AsGa (zones grises). Le rectangle en pointillé montre le défaut inséré dans le cristal. (b) et (c) correspondent à la transmission à travers la cavité dans le cas d'un simple accepteur et donneur, respectivement, insérés au centre du cristal.

Les applications des cavités photoniques s'étendent du domaine optique à l'optoélectronique. Les bandes d'énergies relativement plates du diagramme de dispersion, qui correspondent aux modes de résonance, sont utilisées pour contrôler la durée de vie des photons. Ces bandes plates correspondent à des vitesses de groupe très faibles, ce qui signifie que le temps moyen d'interaction des photons avec le matériau peut être grand. Les cavités

présentant de forts facteurs de qualité Q et des volumes de mode V très faibles, suscitent de vifs intérêts notamment pour le contrôle de l'émission spontanée et la réalisation de sources à photon unique [30–32]. Par ailleurs, les défauts linéaires dans les cristaux photoniques présentent des propriétés de confinement de la lumière permettant la réalisation des guides d'onde photoniques [33]. Une autre fonction particulièrement importante d'optique intégrée pourrait être réalisée avec des cristaux photoniques : le multiplexage en longueur d'onde (WDM : Wavelength Division Multiplexing). Le but est d'insérer ou d'extraire des longueurs d'onde précises dans un flux de données. Un tel dispositif peut être obtenu en utilisant des cavités résonantes couplés à des guides d'onde [34].

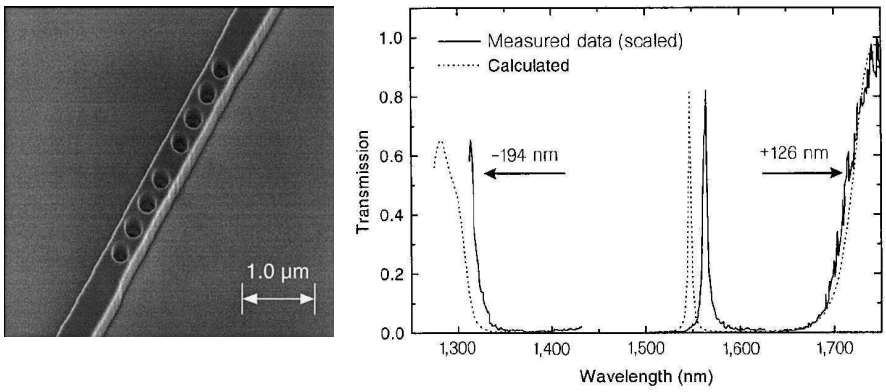


FIG. 1.16 – (a) image MEB de la structure étudiée, (b) spectre de transmission théorique (pointillée) et expérimentale (continue) de la structure où un pic de résonance apparaît pour $\lambda = 1550nm$. (D'après [6])

Les propriétés optiques des microcavités photoniques, telles que le confinement du champ électrique dans les zones à faible indice (trous d'air) et leur grand facteur de qualités, permettent d'être très sensibles aux variations locales de l'environnement comme l'indice de réfraction, la température, la pression, l'absorption...Les recherches sur les microcavités à cristaux photoniques en tant que dispositifs pour des applications capteurs semblent donc être un domaine prometteur, motivé par la miniaturisation, la grande sensibilité et leur intégration dans les microsystèmes (MEMS). Dans la dernière décennie, différentes études théoriques et expérimentales ont été réalisées pour l'application des cavités photoniques en tant que sondes de capteur de gaz [7, 35, 36], de force et de température [37], de protéines

et de biomolécules [8, 9, 38–40], d'ADN [41], d'indice de réfraction [42],...

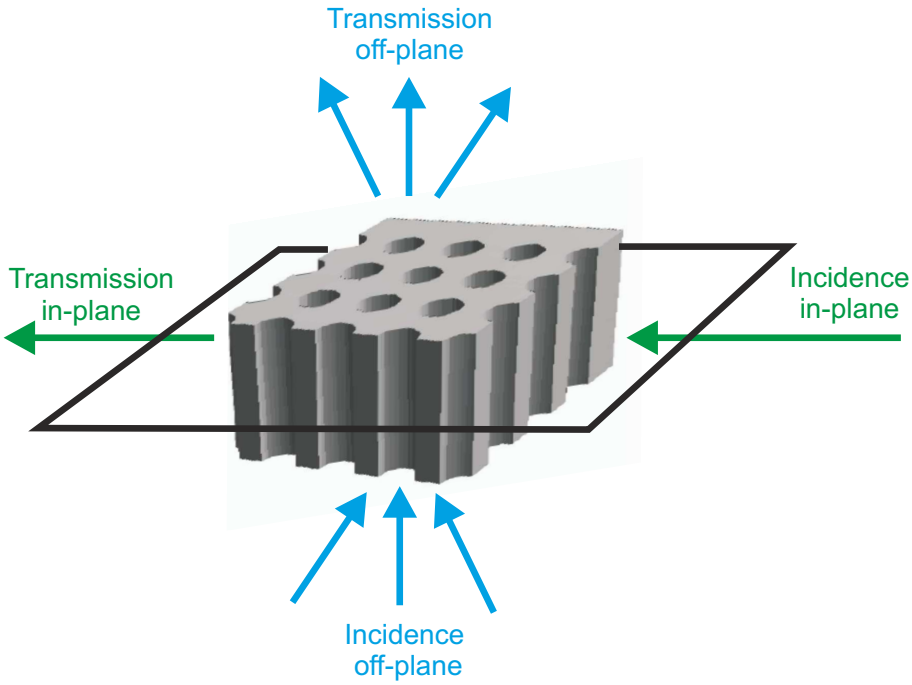


Fig. 1.17 – Schéma montrant l'incidence dans le plan (in-plane) en vert, et l'incidence hors plan (off-plane) en bleu.

1.6 Cavités photoniques et applications à la détection des molécules biochimiques et des gaz

En comparaison avec d'autres technologies qui emploient les oxydes métalliques [43, 44], des électrolytes solides [45, 46], ou une analyse chromatographique [47], les capteurs optiques permettent la mesure des phénomènes en temps réel, avec une sensibilité inférieure au ppm et avec une sélectivité qui peut être assurée par la réaction biochimique. L'efficacité et la souplesse de ce type de capteurs résident dans la diversité de leurs propriétés optiques qui peuvent être exploitées dans les domaines spectral ou/et temporel. On peut citer en exemple de ces propriétés l'indice de réfraction, l'absorption, la fluorescence, la polarisation et même des effets optiques non-linéaire (diffusion Raman,...). On peut souligner que les capteurs optiques sont très appréciés notamment pour la biodétection comme en atteste le

marché international des capteurs optiques biochimiques qui a crû de 4000 M€ en 2004 à 6000 M€ en 2009 [48]. Exploiter des nanostructures pour la réalisation de capteurs optiques offre notamment les intérêts suivants : (1) Forte interaction lumière-matière. (2) Miniaturisation et multiplexage (3) Intégration de la microfluidique avec les composants optiques.

Des différentes architectures optiques développées, les cavités photoniques 2D à grand facteur qualité apparaissent comme très prometteuses pour les applications capteurs de gaz car l'introduction de pores dans le matériau permet de préserver des surfaces d'interaction importantes tout en diminuant la longueur active de détection en comparaison avec les structures optiques classiques.. On peut distinguer deux manières pour détecter la variation au niveau spectral due à la présence des biomolécules et des gaz. La première consiste à envoyer le faisceau suivant une incidence hors plan (out off-plane), et la deuxième suivant une incidence dans le plan (figure 1.17). Dans ce qui suit, nous nous intéressons plutôt à l'incidence dans le plan (in-plane) qui permet de réaliser des composants plus compacts.

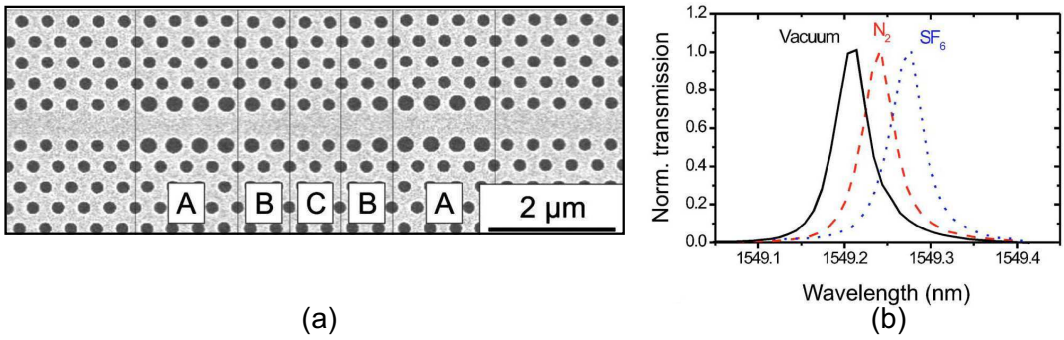


Fig. 1.18 – (a) Image MEB de la cavité d'après Sunner et al. [7]. (b) Spectres de transmission de la cavité correspondant à différents types de gaz.

Deux principales configurations peuvent être distinguées pour détecter les molécules et les gaz en utilisant des cristaux photoniques 2D. La première repose directement sur l'infiltration de l'analyte dans les trous d'air. La présence des gaz ou des liquides induit une variation de l'indice de réfraction des trous d'air. La variation d'indice génère, à son tour, un déplacement du pic de résonance de la cavité. Sunner et al. [7] étudièrent la réponse d'une cavité photonique, réalisée sur un substrat d'AsGa, en fonction de la variation de

l'indice de réfraction induite par la présence de certains gaz dans le milieu. Ils ont démontré qu'une variation de 10^{-4} de l'indice de réfraction pouvait induire un déplacement de 8pm de la position du pic de résonance de la cavité. La figure 1.18(a) nous montre la cavité étudiée ayant un facteur de qualité de 380000. Le spectre de transmission de la cavité, en présence de différents types de gaz, est donné dans la figure 1.18(b). Chow et al. [8] démontrèrent, quant à eux, qu'une variation de l'indice de réfraction de 0.002 pouvait induire une variation de 0.4nm du pic de résonance d'une cavité de type SHD réalisée sur un substrat de silicium. Les figures 1.19(a) et (b) montrent, respectivement, la cavité étudiée et les spectres expérimentaux obtenus pour différentes valeurs de l'indice de réfraction.

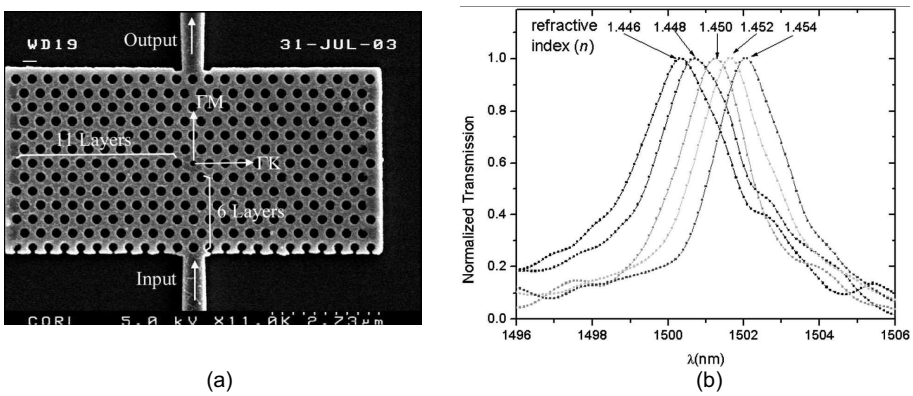


FIG. 1.19 – (a) Image MEB de la cavité intégrée sur deux ridges. (b) spectres de transmission normalisés de la cavité pour différentes valeurs de l'indice de réfraction [8].

Le deuxième principe repose sur des cavités photoniques recouvertes d'une couche sensible. Dans ce cas la surface et/ou les trous d'air du CP seront recouverts d'une couche de polymère ou d'une substance spécifique avec laquelle la molécule à détecter interagit. Mindy Lee et al. [9] étudièrent une cavité photonique de type SHD, réalisée sur un substrat de SiO_2, fonctionnalisée par des couches de protéines. En présence du glutaraldehyde (substance utilisée pour la fixation des protéines) et du BSA (Bovine Serum Albumin), le pic de résonance subit un déplacement de l'ordre de 0.5nm induit par une variation d'indice de 0.002. La présence d'une couche sensible a permis d'augmenter la sensibilité du dispositif, permettant de détecter des molécules ayant une masse de $2.5fg$. Les variations de la position du pic de résonance sont montrées dans la figure 1.20(b), où le pic (a) représente la résonance de la cavité fonctionnalisée. Les 2 pics (b) et (c) représentent, respectivement,

la résonance en présence de $2\mu L$ d'une solution contenant 2.5% de glutaraldehyde et en présence de $2\mu L$ d'une solution contenant 2% de BSA.

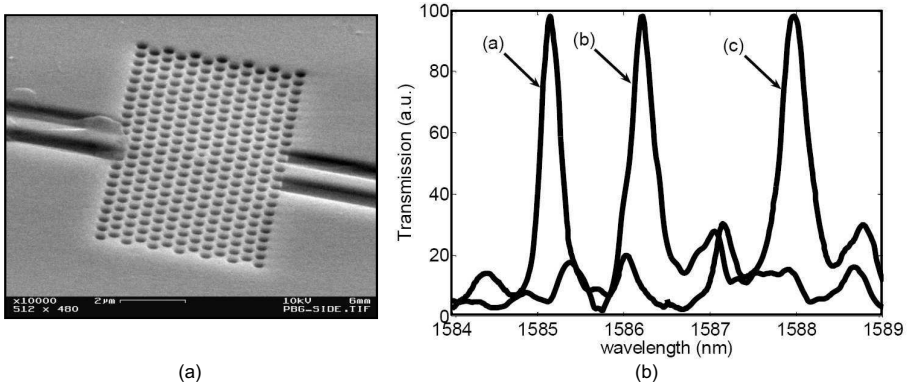


Fig. 1.20 – (a) Image MEB de la cavité étudiée par M. Lee et al [9]. (b) Spectre de transmission de la cavité au niveau de la résonance pour trois cas différents : (a) dans le vide, (b) dans la présence de glutaraldehyde, (c) dans la présence de BSA.

S. Chakravarty et al. [39], ont mis en évidence le potentiel des microcavités photoniques réalisées sur un substrat d'AsGa à la détection des ions de type ClO_4^- et Ca^{2+}, en étudiant, toujours, l'effet de la variation de l'indice de réfraction sur la réponse spectrale des cavités photoniques. La surface de la cavité photonique est recouverte par une couche de polymère sélective et spécifique pour la détection des ions. La réponse spectrale de la cavité, schématisée dans la figure 1.21(b) et (c), est obtenue par photoluminescence et montre une variation de la position du pic de résonance de 20nm pour une concentration de ClO_4^- variant de 10^{-3} à 10^{-6} M, et de 5 nm pour une variation de 10^{-2} à 10^{-6} M de Ca^{2+}.

Tous ses résultats confirment l'intérêt d'exploiter des microcavités recouvertes d'une couche sensible pour réaliser des capteurs. Dans son ouvrage, *Advanced Photonic Structures for Biological and Chemical Detection* [49], X. Fan décrit les différents principes de détection biochimique par voie optique, et met en évidence des méthodes pour améliorer les performances d'un composant pour la détection des gaz et des molécules. Son étude confirme que la sensibilité du capteur est accrue lorsque le dispositif permet un confinement de l'énergie électromagnétique au même endroit que la surface fonctionnalisée. Alors, confiner le champ électromagnétique (EM) dans des volumes très petits et ayant une densité

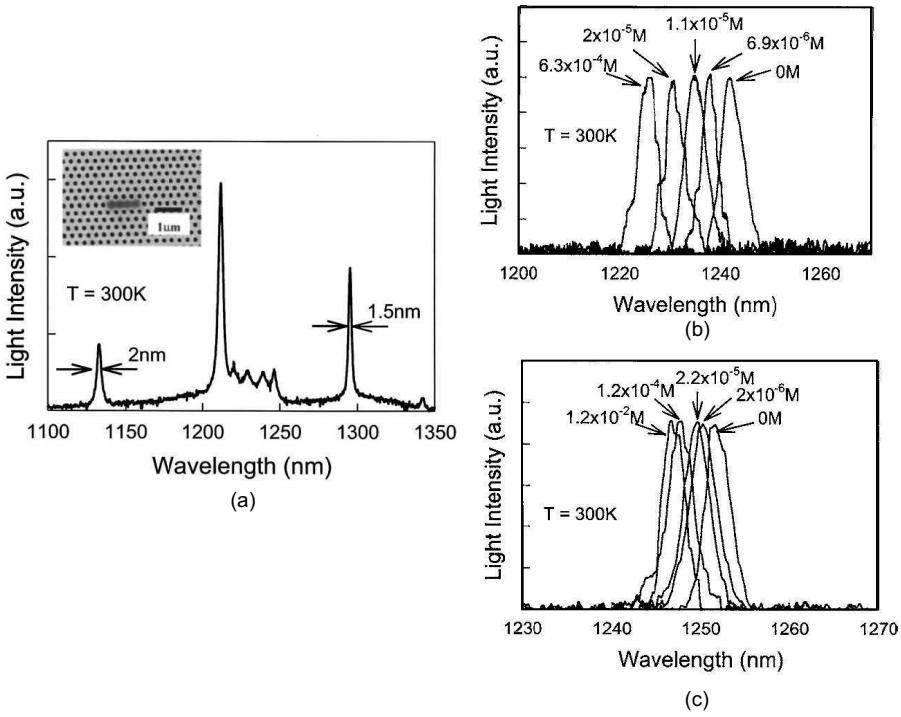


FIG. 1.21 – (a) Image MEB de la cavité L3 avec le spectre obtenue par photoluminescence et montrant la présence de 3 pics de résonance. Variation de la position du pic de résonance, correspondant à une concentration de 0M, en présence de différentes concentration d'ions ClO_4^-(b) et Ca^{2+}(c).

d'énergie dans cette région qui soit la plus grande possible (le cas des cavités photoniques 2D), rend la surface de fonctionnalisation plus petite. Par conséquent, on peut ainsi espérer obtenir des composants miniatures, de l'ordre de quelques μm^2 tout en préservant une grande sensibilité, assurée par l'interaction lumière-matière d'une part et l'interaction gaz-surface fonctionnalisée d'autre part.

1.7 Objectifs et originalités

L'idée ramenée dans notre travail est d'étudier une cavité photonique fonctionnalisée par une couche sensible, qui présente un pic d'absorption coïncidant avec le pic de résonance de la cavité. Cette dernière est représentée dans la figure 1.22(a). Les molécules de gaz sont adsorbées par la couche sensible (figure 1.22(b). En présence du gaz, l'absorption de

la couche varie, induisant une variation de l'intensité du pic de résonance de la cavité. Nous verrons qu'en exploitant ainsi la variation d'absorption de la couche sensible, nous pouvons obtenir une sensibilité accrue du dispositif, en comparaison des configurations qui n'exploitent que la variation d'indice de la couche sensible. Une autre originalité du sujet repose sur le choix du matériau utilisé, le niobate de lithium, un matériau actif dont on peut contrôler le point de fonctionnement. Pour notre dispositif, la présence de l'analyte est détectée par une variation de l'intensité du pic de résonance, plutôt que par le décalage en longueur d'onde. La variation d'intensité est due ici à la faible variation de l'indice de réfraction, de l'épaisseur de la couche et aussi à l'absorption de cette dernière. Un tel dispositif nous assure les propriétés suivantes :

1. Détection en temps réel grâce à l'interaction lumière - matière.
2. Compacité assurée grâce à la nanostructuration du dispositif, qui correspond à un trou-cavité de quelques dizaines de nanomètres entouré de trous de quelques centaines de nanomètres, l'ensemble couvrant une surface de l'ordre de $50\mu m^2$.
3. Détection sélective grâce à la fonctionnalisation par une couche sensible sélective du dispositif optique.
4. Possibilité de multidétection grâce au faible encombrement des structures (cf Fig.1.23).
5. Sensibilité de l'ordre du ppm assurée par le fort confinement lumineux et la faible surface d'interaction. En effet, le champ optique est fortement confiné dans un volume de l'ordre de λ^3, ce qui permet de préserver la sensibilité malgré la petite dimension d'interaction. Par ailleurs, l'arrangement périodique de pores fonctionnalisés avec des dimensions nanométriques permet de garder la même surface de détection qu'un composant 10 fois plus grand fonctionnalisé uniquement en surface.
6. Possibilité de contrôler le point de fonctionnement grâce à l'utilisation d'un matériau actif.
7. Intégration du composant car la détection repose sur la mesure de la transmission.

Deux objectifs sont à atteindre dans cette thèse. Le premier, est de proposer une étude théorique d'une nanostructure originale capable de détecter des gaz. Le deuxième objectif

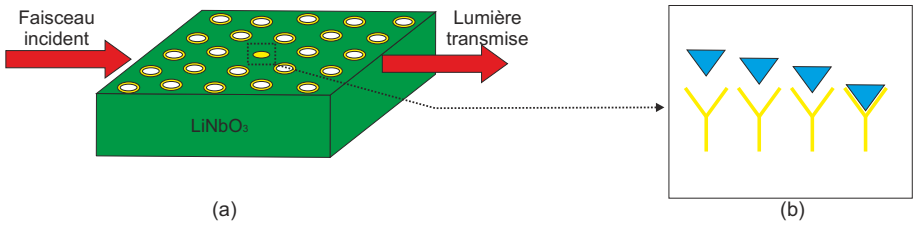


FIG. 1.22 – (a) La cavité SHD étudiée pour la détection des gaz où les zones jaunes représentent les couches sensibles. (b) Principe de détection où les molécule de gaz (en bleu) présentes dans le milieu seront adsorbées par la couche (en jaune).

réside dans la réalisation de différents types de cavités photoniques sur $LiNbO_3$, qui sera la première étude en terme de réalisation et de caractérisation dans le domaine de la nanophotonique. Ainsi, cette thèse est divisée en deux aspects, un théorique et un autre expérimental.

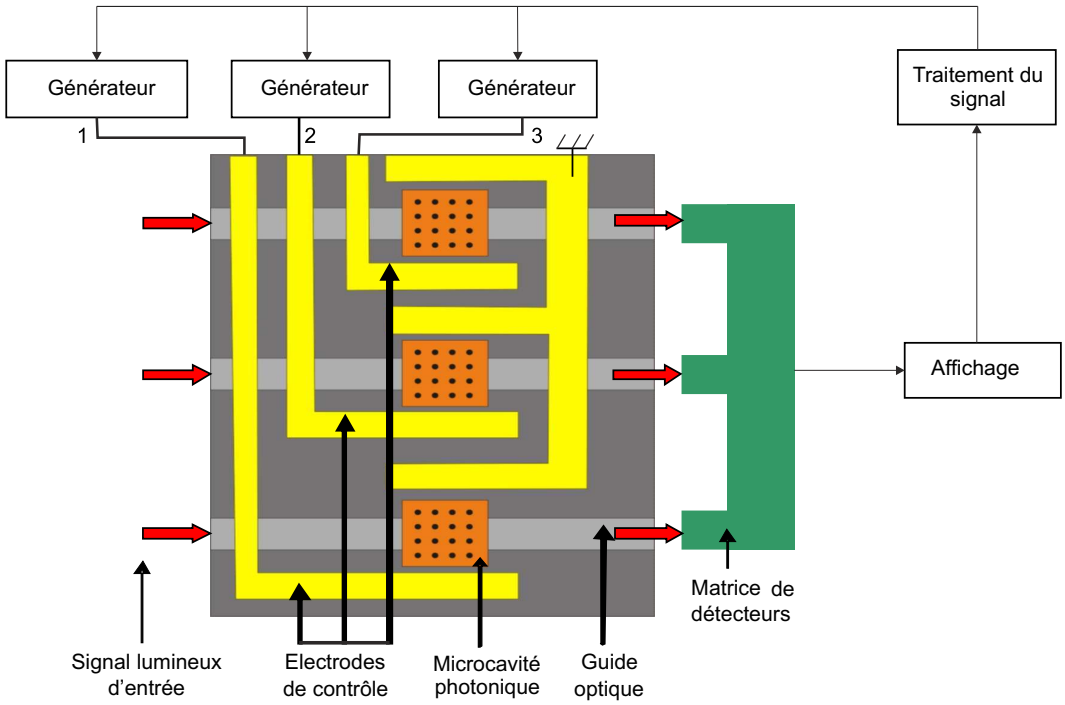


FIG. 1.23 – schéma de principe des structures visées à terme. L'élément d'étude de notre thèse est représenté en orange : c'est un cristal photonique dont la transmission varie en présence d'un gaz. La variation d'intensité transmise est mesurée par un photodétecteur. Sur le schéma, trois capteurs sont représentés en parallèle pour montrer la façon dont la multidétection pourra s'effectuer à terme.

1.7.1 Aspect théorique

L'étude théorique développée dans cette thèse requiert plusieurs considérations. Tout d'abord, les deux méthodes utilisées sont la méthode des ondes planes (PWE) et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), qui seront détaillées dans le chapitre suivant. L'étude théorique est divisée en deux parties, dans lesquelles il faut répondre à des questions détaillées en-dessous.

1. **Etude d'une cavité pour la détection des gaz**

   a) Quelles conditions la cavité photonique doit couvrir ? En tenant compte de :
      - La longueur d'onde qui nous intéresse ($\lambda = 420nm$).
      - La présence d'une couche sensible autour des trous d'air, par la modification de la PWE.
      - L'absorption des couches sensibles, par l'implémentation d'un modèle de dispersion dans la FDTD.

   b) Quelle géométrie, pour la cavité photonique, est la plus adaptée pour obtenir un mode de résonance, ainsi une petite vitesse de groupe ?

   c) Suivant quelle direction de propagation obtient-on une bande interdite photonique dans laquelle on a le mode de résonance de la cavité ?

2. **Etude des cavités photoniques dans le domaine de l'infrarouge (1550nm)**

   a) Etude en transmission et en réflexion de deux types de cavités sur un substrat de niobate de lithium.

   b) Etude de l'effet de la taille de la cavité sur l'intensité du mode de résonance.

   c) Etude de l'effet de la largeur du guide optique sur le mode de résonance de la cavité.

   d) Etude de la distribution du champ électromagnétique dans la cavité en fonction de la longueur d'onde.

1.7.2 Aspect Expérimental

L'étude expérimentale comprend la réalisation en salle blanche des cavités et la caractérisation optique en champ lointain et en champ proche.

1. Réalisation des guides d'onde obtenus par échange protonique sur un substrat de niobate de lithium.
2. La fabrication des cavités sur les guides d'ondes en utilisant le faisceau d'ions focalisé.
3. Caractérisation optique en transmission et en réflexion des cavités photoniques.
4. Caractérisation optique en champ proche des cavités.

1.8 Conclusion

Les cristaux photoniques sont des matériaux dont la constante diélectrique varie de façon périodique, à l'échelle de la longueur d'onde, suivant les différentes directions de l'espace. Les cavités photoniques, obtenues en insérant un ou plusieurs défauts dans la périodicité du cristal photonique, présentent des propriétés très importantes comme le confinement du champ électromagnétique dans des petites volumes et l'apparition des modes de résonance dans les bandes interdites photoniques. Dans ce chapitre nous avons discuté des cavités photoniques et de leurs applications dans différents domaines. Nous avons aussi mis en évidence l'application de ces derniers en tant que sonde de capteur pour la détection des gaz. Elles représentent une plate-forme très prometteuse pour le futur des systèmes miniatures de détection car ils présentent les qualités requises de tailles et de confinement. Dans la suite du travail nous développons les méthodes numériques utilisées dans cette thèse, la méthode des ondes planes et la méthode des différences finies dans le domaine temporel, les changements et les modèles apportés à ces deux méthodes.

Chapitre 2

Etude théorique et simulations numériques

Plusieurs approches, basées sur la résolution des équations de Maxwell, ont été proposées pour l'étude théorique des cristaux photoniques et pour la recherche des bandes interdites photoniques, comme par exemple, la méthode des matrices de transfert [50, 51], la méthode des ondes planes [52], la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD : Finite Difference Time Domain) [53], la méthode des éléments finies (FEM : Finite Element Method) [54, 55],... Parmi celles-ci, la méthode des ondes planes (PWE : Plane Wave Expansion) et la FDTD sont les méthodes numériques les plus utilisées pour le calcul des diagrammes de dispersion des cristaux photoniques (CP) d'une part et pour la détermination des bandes interdites photoniques (BIP) d'autre part.

La méthode des ondes planes est basée sur la résolution des équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel, et permet de déterminer la structure de bande d'un CP et la distribution du champ électromagnétique (EM) dans le cas d'un cristal de dimension infinie. La méthode des différences finies (FDTD), quant à elle, est principalement utilisée pour étudier la transmission et la réflexion de la lumière à travers des structures de dimensions finies, ainsi que pour le calcul de la distribution du champ EM à n'importe

quelle longueur d'onde, et le calcul des pertes de propagation dans le CP. Dans tous les cas, il s'agit d'étudier l'interaction matière-rayonnement à l'échelle sub-longueur d'onde. Ici, les milieux considérés sont principalement caractérisés par leurs propriétés diélectriques.

Dans ce chapitre, nous expliciterons en détail la méthode des ondes planes et les changements ramenés pour tenir compte de la présence d'un troisième milieu défini par sa constante diélectrique. Ensuite, la méthode supercell, adaptée à l'étude des cavités photoniques, sera décrite. Nous donnerons un descriptif du code FDTD que nous avons utilisé au cours de cette thèse et qui nous a permis ensuite d'évaluer l'influence sur la transmission de la variation de l'absorption de la couche sensible et d'étudier la structure globale spatialement limitée, et nous décrirons le modèle de Lorentz qui a été adapté à ce code pour la description de la dispersion et de l'absorption des couches sensibles.

Nous allons commencer par décrire les équations macroscopiques de Maxwell sur lesquelles sont basées les deux méthodes utilisées.

2.1 Equations de Maxwell

Tout l'électromagnetisme macroscopique, et notamment la propagation de la lumière dans les cristaux photoniques, est gouverné par les quatres équations macroscopiques de Maxwell. Dans le S.I., ces équations peuvent être exprimées de la façon suivante :

$$div\ \overrightarrow{D}(\overrightarrow{r},t) = 0 \tag{2.1}$$

$$div\ \overrightarrow{B}(\overrightarrow{r},t) = 0 \tag{2.2}$$

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\overrightarrow{B}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.3}$$

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\overrightarrow{D}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.4}$$

où $\overrightarrow{E}$ est le champ électrique, $\overrightarrow{H}$ le champ magnétique, $\overrightarrow{D}$ le déplacement électrique et $\overrightarrow{B}$ l'induction magnétique. Les relations donnant $\overrightarrow{D}$ en fonction de $\overrightarrow{E}$, et $\overrightarrow{B}$ en fonction de $\overrightarrow{H}$, dans un milieu de constante diélectrique $\varepsilon(\overrightarrow{r})$ sans charges, sans sources de courant et non magnétique, appelées les relations de constitutions sont les suivantes :

$$\overrightarrow{D}(\overrightarrow{r},t) = \varepsilon_0\varepsilon(\overrightarrow{r})\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.5}$$

$$\overrightarrow{B}(\overrightarrow{r},t) = \mu_0\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.6}$$

où μ_0 et ϵ_0 sont respectivement la perméabilité magnétique et la permittivité diélectrique du vide.

2.2 Méthode des ondes planes

La méthode la plus utilisée pour déterminer les modes propagatifs, appelés modes de Bloch, et l'équation de dispersion d'un cristal photonique est la méthode des ondes planes, qui opère dans l'espace de Fourier celui du réseau réciproque. Elle s'applique à toutes les structures dont la constante diélectrique est une fonction périodique de l'espace. La PWE est une méthode vectorielle qui traite le problème électromagnétique macroscopique en appliquant une périodicité aux conditions de limites. Le théorème de Bloch permet de décomposer le champ magnétique ou électrique sur une base d'ondes planes et de transformer la résolution des équations de Maxwell en un problème classique de diagonalisation de matrices (calcul de valeurs et vecteurs propres).

La méthode de décomposition en ondes planes est très efficace pour calculer les diagrammes de bandes de cristaux photoniques parfaitement périodiques. Elle peut être adaptée pour étudier les cavités grâce à la technique des supercell qui consiste à considérer des cellules élémentaires constituées de plusieurs trous, qui se répètent de façon périodique.

2.2.1 Théorème de Floquet-Bloch

Le cristal photonique peut-être défini comme un matériau présentant une variation périodique de la constante diélectrique dans les différentes directions de l'espace. La périodicité de la permittivité $\varepsilon(\overrightarrow{r})$ implique :

$$\varepsilon(\overrightarrow{r} + \overrightarrow{R}) = \varepsilon(\overrightarrow{r}) \tag{2.7}$$

où $\overrightarrow{R}$ peut être représenté par :

$$\overrightarrow{R} = l\overrightarrow{a_1} + m\overrightarrow{a_2} + n\overrightarrow{a_3} \tag{2.8}$$

où $\overrightarrow{a_i}$ (i=1,2 ou 3) sont les vecteurs élémentaires du réseau direct du CP, c.à.d que la position de chaque motif appartenant au CP peut être écrit sous forme d'un vecteur $\overrightarrow{R}$. l, m et n sont des entiers indiquant la position du motif dans le repère (a_1,a_2,a_3). Puisque la permittivité diélectrique présente une périodicité spatiale, on peut développer $\varepsilon^{-1}(\overrightarrow{r})$ en série de Fourier. Pour cela, on introduit les vecteurs élémentaires du réseau réciproque, $\overrightarrow{b_i}$ où

$$\overrightarrow{a_i}.\overrightarrow{b_j} = 2\pi\delta_{ij} \; avec \; \delta_{ij} = \begin{vmatrix} 1 & si \; i = j \\ 0 & ailleurs \end{vmatrix}$$

Dans notre contexte, les vecteurs de base du réseau réciproque sont directement liés au vecteur d'onde $\overrightarrow{k}$ et jouent un rôle essentiel dans la théorie de la PWE. Dans ce cas chaque vecteur de l'espace réciproque peut être exprimé de la façon suivante :$\overrightarrow{G} = h_1\overrightarrow{b_1} + h_2\overrightarrow{b_2} + h_2\overrightarrow{b_3}$ où h_1, h_2 et h_3 sont des entiers arbitraires. Alors $\varepsilon^{-1}(\overrightarrow{r})$ est exprimée par :

$$\frac{1}{\varepsilon(\overrightarrow{r})} = \sum_{\overrightarrow{G}} \kappa(\overrightarrow{G}).\exp(\imath\overrightarrow{G}.\overrightarrow{r}) \tag{2.9}$$

avec $\kappa(\overrightarrow{G})$ représente le coefficient de Fourier. Nous supposons que ε est réel, ce qui implique $\kappa(\overrightarrow{G}) = \kappa^*(\overrightarrow{G})$. Nous substituons maintenant les équations 2.5 et 2.6 dans 2.1 et 2.4 pour

obtenir :

$$div\ [\varepsilon(\overrightarrow{r}).\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t)] = 0 \tag{2.10}$$

$$div\ \overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t) = 0 \tag{2.11}$$

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t) = -\mu_0\frac{\partial}{\partial t}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.12}$$

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t) = \epsilon_0\varepsilon(\overrightarrow{r})\frac{\partial}{\partial t}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t) \tag{2.13}$$

En éliminant $\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r},t)$ et $\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r},t)$, respectivement, de 2.12 et 2.13, et en supposant que les composantes électromagnétiques ont une dépendance harmonique en temps de type exp*(-iωt)*, alors la dérivée par rapport au temps peut être substituée par *-iω*. Les équations de Maxwell différentielles s'écrivent dans ce cas de la façon suivante :

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}) = i\omega\mu_0\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}) \tag{2.14}$$

$$\overrightarrow{rot}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}) = -i\omega\epsilon_0\varepsilon(\overrightarrow{r})\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}) \tag{2.15}$$

Des deux équations de Maxwell précédentes découlent les équations d'ondes suivantes :

$$\frac{1}{\varepsilon(\overrightarrow{r})}\overrightarrow{\nabla}\wedge\{\overrightarrow{\nabla}\wedge\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r})\} = \frac{\omega^2}{c^2}\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}) \tag{2.16}$$

$$\overrightarrow{\nabla}\wedge\{\frac{1}{\varepsilon(\overrightarrow{r})}\overrightarrow{\nabla}\wedge\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r})\} = \frac{\omega^2}{c^2}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}) \tag{2.17}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide qui est donnée par : $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu 0}}$. Pour des structures infinies, le théorème de Bloch montre qu'une onde plane est modulée par la périodicité de la structure. Alors, si nous développons en série de Fourier le champ magnétique $\overrightarrow{H}$, par exemple, il sera exprimé de la façon suivante :

$$\overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}) = \sum_{\overrightarrow{G_i},\overrightarrow{N}}\overrightarrow{H}(\overrightarrow{G_i}).\widehat{e}_N.\exp((i\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G_i}).\overrightarrow{r}) \tag{2.18}$$

On note N=1 ou 2 et $\widehat{e}_1$, $\widehat{e}_2$ étant deux vecteurs unitaires perpendiculaires à $(\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G_i})$. Le même raisonnement est fait aussi pour le champ électrique. Enfin, en injectant 2.18 et

2.9 dans 2.17, on arrive à l'équation matricielle suivante :

$$\sum_{\overrightarrow{G'}} |\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G}||\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G'}|\varepsilon^{-1}(\overrightarrow{G}-\overrightarrow{G'}) \begin{pmatrix} \widehat{e}_2.\widehat{e_2'} & -\widehat{e}_2.\widehat{e_1'} \\ -\widehat{e}_1.\widehat{e_2'} & \widehat{e}_1.\widehat{e_1'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1' \\ h_2' \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \tag{2.19}$$

La résolution de 2.19 peut se faire en utilisant la méthode de diagonalisation. Pour chaque valeur du vecteur d'onde $\overrightarrow{k}$, on peut obtenir une série de fréquences propres $\omega_{\overrightarrow{k},n}$(valeurs propres de la matrice) qui va constituer la structure de bande photonique en choisissant le nombre adéquat de bandes souhaité $\boldsymbol{N}$ [17]. Il existe des simplifications pour les cristaux photoniques 1D et 2D. Pour les structures 2D, par exemple, on considère que la constante diélectrique est invariante suivant la direction z. Dans le cas d'une propagation dans le plan xy, k_z=0, $e_2 = e_z$ et e_1 est toujours dans le plan xy, on a alors les deux polarisations h_1 et h_2 qui sont indépendantes. Tant que h_1 est dans le plan xy, h_2 est suivant z, alors h_1 correspond à TE et h_2 à TM (voir figure 2.1), et l'équation 2.19 se décompose en modes TE et TM suivant les deux équations suivantes :

$$TE : \qquad \sum_{\overrightarrow{G'}} |\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G}||\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G'}|\varepsilon^{-1}(\overrightarrow{G}-\overrightarrow{G'})h_1(\overrightarrow{G'}) = \frac{\omega^2}{c^2}h_1(\overrightarrow{G}) \tag{2.20}$$

$$TM : \qquad \sum_{\overrightarrow{G'}} (\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G}).(\overrightarrow{k}+\overrightarrow{G'})\varepsilon^{-1}(\overrightarrow{G}-\overrightarrow{G'})h_2(\overrightarrow{G'}) = \frac{\omega^2}{c^2}h_2(\overrightarrow{G}) \tag{2.21}$$

En tenant compte du théorème de Bloch et de la périodicité dans l'espace réciproque, le vecteur d'onde peut être réduit à un vecteur d'onde appartenant à la première zone de Brillouin. Par ailleurs, en tenant compte de la symétrie de la première zone de Brillouin, on peut calculer les fréquences propres pour les vecteurs d'onde à la frontière de cette zone, et $\overrightarrow{k}$ doit alors balayer le contour de la zone irreductible de Brillouin pour avoir les différents modes de Bloch.

Pour déterminer la structure de bande d'un cristal photonique, il est nécessaire de calculer les coefficients de Fourier de la constante diélectrique ou de son inverse. Nous illustrerons le calcul de ces coefficients aux deux différents cas qui serviront dans l'étude de notre struc-

ture envisagée pour les applications des cristaux photoniques 2D en tant que capteur de gaz. Le premier cas correspond à un cristal photonique 2D constitué de cylindres de section circulaire. Le deuxième cas, celui qui nous intéresse pour nos applications, correspond à un CP-2D de motifs à deux indices périodiques.

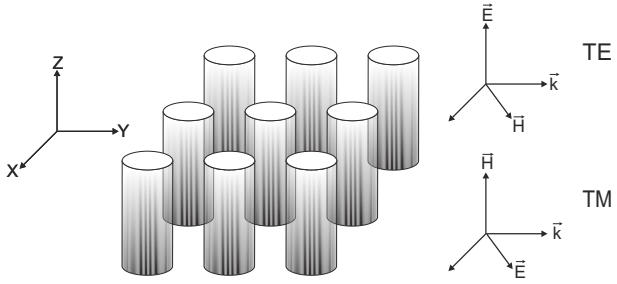


FIG. 2.1 – Exemple de réseau bidimensionnel, périodique dans le plan (x,y) et invariant selon z, et définition correspondante des polarisations TE et TM.

2.2.2 Calcul des coefficients de Fourier

Pour la méthode des ondes planes, il est nécessaire de résoudre le système d'équations, 2.20 et 2.21. Nous étudierons dans le premier cas, un cristal photonique 2D, illustré dans la figure 2.2 (a), constitué de cylindres d'air dans un substrat de niobate de lithium de constante diélectrique ϵ_b. En raison de la non périodicité de la structure dans la direction z, le coefficient d'expansion de Fourier, qui correspond à la transformée de Fourier inverse de $\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r}_\parallel)}$ est exprimé comme suit :

$$\kappa(G_\parallel) = \frac{1}{V_0}\int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel \frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r}_\parallel)} \exp(-\imath \boldsymbol{G}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel) \tag{2.22}$$

où V_0 est le volume du cylindre d'air. Le but maintenant revient à calculer le coefficient $\kappa(G_\parallel)$ dans les deux cas suivants :

cas 1 : Cylindres d'air dans un substrat

Si r_a et ϵ_a, respectivement, le rayon et la constante diélectrique des cylindres d'air (cf Fig.

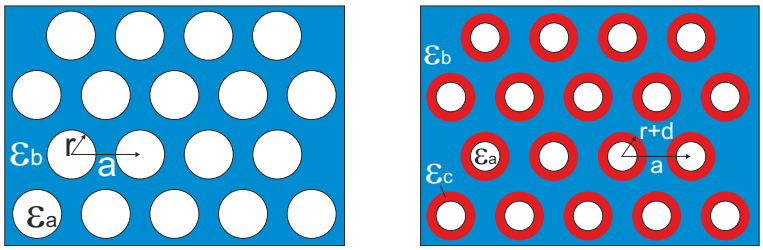


Fig. 2.2 – Les structures étudiées dans un substrat de niobate de lithium de constante diélectrique ε_b, région bleu. (a) Cristal photonique 2D composé de cylindre d'air ε_a, zone blanche. (b) Cristal photonique 2D composé de cylindres d'air entourés par un milieu de constante diélectrique ε_c, région rouge.

2.2(a)), alors $\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r}_\parallel)}$ est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r}_\parallel)} = \frac{1}{\varepsilon_b} + (\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) S(\boldsymbol{r}_\parallel) \tag{2.23}$$

où $S(\boldsymbol{r}_\parallel)$ est définie par :

$$S(\boldsymbol{r}_\parallel) = \begin{cases} 1 & pour \quad \mid r_\parallel \mid \leq r_a \\ 0 & pour \quad \mid r_\parallel \mid > r_a \end{cases}$$

et en substituant l'équations 2.23 dans 2.22 nous obtenons l'expression du coefficient de Fourier en fonction des différentes constantes diélectriques [17].

$$\kappa(G_\parallel) = \frac{1}{\varepsilon_b}\delta_{G_{\parallel 0}} + \frac{1}{V_0}(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) \int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel S(\mathbf{r}_\parallel) \exp(-\imath \boldsymbol{G}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel) \tag{2.24}$$

Dans le but de calculer l'intégral de l'équation 2.24, on utilise les coordonnées polaires (r,φ). Pour $G_\parallel \neq 0$ l'intégrale en question devient une intégrale double, et sa résolution s'effectue de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &\int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel S(\mathbf{r}_\parallel) \exp(-\imath \mathbf{G}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel) = \int_0^{r_a} dr \int_0^{2\pi} r \; d\varphi \; \exp\{\imath G r \sin(\varphi - \frac{\pi}{2})\} \\ &= \int_0^{r_a} dr \int_0^{2\pi} r \; d\varphi \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_1(Gr) \exp\{\imath l(\varphi - \frac{\pi}{2})\} = 2\pi \int_0^{r_a} r J_0(Gr) dr \\ &= \frac{2\pi r_a}{G} J_1(G r_a) \end{aligned} \tag{2.25}$$

avec G=$G_{\parallel}$ et J_1 est la fonction de Bessel d'ordre 1. Si on note f le facteur de remplissage concernant les cylindres d'air, alors $f = \frac{\pi r_a^2}{V_0}$ et on obtient finalement pour $G_{\parallel} \neq 0$

$$\kappa(G_{\parallel}) = 2f(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b})\frac{J_1(Gr_a)}{Gr_a} \tag{2.26}$$

et pour $G_{\parallel} = 0$

$$\kappa(0) = f(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) + \frac{1}{\varepsilon_b} \tag{2.27}$$

Dans le cas d'une maille triangulaire, le facteur de remplissage f est exprimé sous la forme $f = \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\frac{r^2}{a^2}$.

Une fois que les coefficients de Fourier sont calculés, la détermination du diagramme de bande devient simple. Nous illustrons un exemple pour une maille triangulaire de trous d'air cylindriques dans un substrat de niobate de lithium dopé MgO, dont la constante diélectrique $\varepsilon_b = 5.319$, avec $\frac{r}{a} = 0.4$ où r est le rayon des trous d'air. Les figures 2.3(a) et (b) montrent la structure de bande pour les deux polarisations TM et TE respectivement, obtenues par le logiciel commercial BandSolve de RSoft. Par contre, (c) et (d) représentent les mêmes diagrammes de dispersion mais avec le code MATLAB développé. Les résultats obtenus par BandSolve et par notre code se coincident, confirmant la validité de notre code. Dans les deux cas, on observe la présence d'une bande interdite photonique complète pour la polarisation TM et qui est absente pour TE.

cas 2 : Cristal photonique à motif annulaire

Maintenant, pour déterminer la structure de bande du cristal photonique fonctionnalisé, on a développé analytiquement les coefficients de Fourier de la fonction diélectrique réciproque pour la structure représentée dans la figure 2.2(b), où coexiste trois milieux de constantes diélectriques différentes. La zone bleu correspond au substrat de niobate de lithium, la blanche aux trous d'air et la zone rouge représente la couche sensible ayant une constante diélectrique ε_c et une épaisseur d. La distribution des permittivités diélectriques est particulière dans notre cas, car il faut prendre en compte la présence de la couche. L'équation 2.23 s'écrit, dans ce cas, en fonction des trois constantes diélectriques des différents milieux

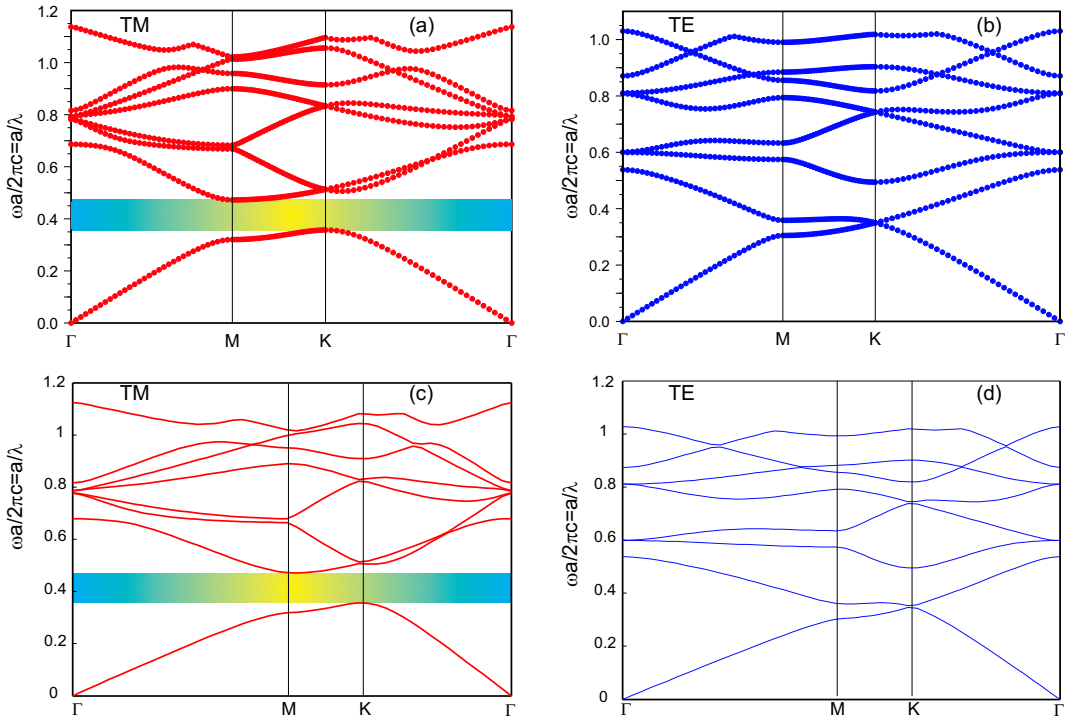


Fig. 2.3 – Structures de bande pour le cristal photonique de la figure 2.2 (a), avec ε_b=4.59 et $\frac{r}{a}$=0.4 où r est le rayon des trous d'air. (a) et (b) correspondent aux résultats BandSolve, (c) et (d) correspondent aux résultats du code MATLAB.(a) et (c) Polarisation TM. (b) et (d) Polarisation TE.

suivant l'expression suivante :

$$\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r}_{\parallel})} = \frac{1}{\varepsilon_b} + (\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b})S(\boldsymbol{r}_{\parallel}) + (\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b})S^{'}(\boldsymbol{r}_{\parallel}) \tag{2.28}$$

avec S et $S^{'}$ sont définis par :

$$S(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \begin{cases} 1 & pour \quad \mid r_{\parallel} \mid \leq r_a \\ 0 & pour \quad \mid r_{\parallel} \mid > r_a \end{cases}$$

$$S^{'}(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \begin{cases} 1 & pour \quad \mid r_a - d \mid < \mid r_{\parallel} \mid \leq r_a \\ 0 & ailleurs \end{cases}$$

et dans ce cas le coefficient de Fourier s'écrit de la forme :

$$\kappa(G_\parallel) = \frac{1}{\varepsilon_b}\delta_{G_{\parallel 0}} + \frac{1}{V_0}(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) \int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel S(\mathbf{r}_\parallel) \exp(-\imath \boldsymbol{G}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel) + \frac{1}{V_0}(\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b}) \int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel S'(\mathbf{r}_\parallel) \exp(-\imath \boldsymbol{G}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel) \tag{2.29}$$

Le calcul de l'intégral sur S est toujours le même et le résultat est donné dans l'équation 2.25. Par contre, le calcul de l'intégrale sur S' est différent du fait que la fonction n'admet pas les mêmes bornes. Dans ce qui suit, on explicitera tout le calcul, étape par étape, afin d'obtenir le coefficient de Fourier dont on a besoin pour le calcul de la structure de bande. L'intégrale sur S' s'écrit :

$$\begin{aligned}
&\int_{V_0} d\boldsymbol{r}_\parallel S'(\mathbf{r}_\parallel) \exp(-\imath \mathbf{G}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel) \\
&= \int_{r_a-d}^{r_a} dr \int_0^{2\pi} r \; d\varphi \; \exp\{\imath G r \sin(\varphi - \frac{\pi}{2})\} \\
&= \int_{r_a-d}^{r_a} dr \int_0^{2\pi} r \; d\varphi \; \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_1(Gr) \exp\{\imath l(\varphi - \frac{\pi}{2})\} \\
&= 2\pi \int_{r_a-d}^{r_a} r J_0(Gr) dr \\
&= \frac{2\pi r_a}{G} J_1(G r_a) - \frac{2\pi(r_a - d)}{G} J_1(G(r_a - d))
\end{aligned} \tag{2.30}$$

En injectant ce résultat et celui de l'équation 2.25 dans 2.29 on obtient l'expression suivante pour le coefficient de Fourier :

$$\kappa(0) = \frac{1}{\varepsilon_b} + f(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) + f(\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b})(\frac{2r_a d + d^2}{r_a^2}) \tag{2.31}$$

et pour $G \neq 0$ l'expression suivante :

$$\kappa(G \neq 0) = 2f(\frac{1}{\varepsilon_a} + \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{2}{\varepsilon_b}) \frac{J_1(G r_a)}{G r_a} - 2f(\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b})(\frac{r_a - d}{r_a})^2 \frac{J_1(G(r_a - d)}{G(r_a - d)} \tag{2.32}$$

Pour vérifier les deux expressions obtenues, on se met dans une condition où ε_c=ε_a et/ou d=0 qui correspond à un cristal photonique formé que de trous d'air. On obtient pour $\kappa(0)$ et $\kappa(G \neq 0)$ les mêmes expressions que celles obtenues dans 2.26 et 2.27. Ainsi les expressions 2.31 et 2.32 sont valables pour les deux configurations (motifs cylindriques

et motifs annulaires) dans le code MATLAB développé. Maintenant que nous avons les expressions des coefficients de Fourier dans le cas d'un cristal photonique 2D à trois milieux différents, nous pouvons injecter ces coefficients dans les équations aux valeurs propres 2.20 et 2.21 pour déterminer la structure de bande des configurations que nous souhaitons étudier. La figure 2.4 montre la structure de bande, pour les deux polarisations TE(bleu) et TM(rouge), d'une maille triangulaire, constituée de trous d'air, dans un substrat de niobate de lithium dopé MgO, entourés par une couche d'indice n_c=1.65 ayant une épaisseur d=0.1a. Le rayon r_a des trous d'air est fixé à 0.3a. (a) et (b) représentent les structures de bandes obtenues par BandSolve en comparaison avec (c) et (d) qui représentent les structures de bande obtenues par notre code MATLAB. On remarque que les résultats obtenus par le code MATLAB coïncident avec ceux obtenus par BanSolve, ce qui montre la validité des expressions 2.31 et 2.32 dans notre étude. En comparant maintenant les résultats de la figure 2.3 à ceux obtenus dans le cas d'une structure à motif annulaire, on remarque que la présence de la couche modifie la position de la bande interdite. Nous verrons dans le chapitre 3 comment nous pouvons exploiter ce phénomène pour l'application des cristaux photoniques en tant que capteurs de gaz.

De plus on a comparé les résultats obtenus par ce code avec ceux obtenus par des méthodes utilisées pour déterminer la structure de bande d'un cristal photonique fonctionnalisée comme la méthode de Maxwell-Garnett utilisée dans la référence [36].

L'approximation de Maxwell-Garnett permet d'obtenir un indice effectif d'un milieu constitué d'intrusions avec différents indices de réfraction. C'est à dire, remplacer deux milieux différents (ici ε_c et ε_s) par un seul défini par un indice effectif $\varepsilon_{Max-Gar}$. L'expression 2.33 donne l'expression de cet indice effectif obtenu à partir d'un substrat de constante diélectrique ε_s et d'intrusion de constante diélectrique ε_c. Dans notre cas, ε_c correspond à la constante diélectrique des couches sensibles.

$$\varepsilon_{Max-Gar} = \varepsilon_s \times \frac{\varepsilon_c(1+2f') - \varepsilon_s(2f'-2)}{\varepsilon_c(1-f') + \varepsilon_s(2+f')} \tag{2.33}$$

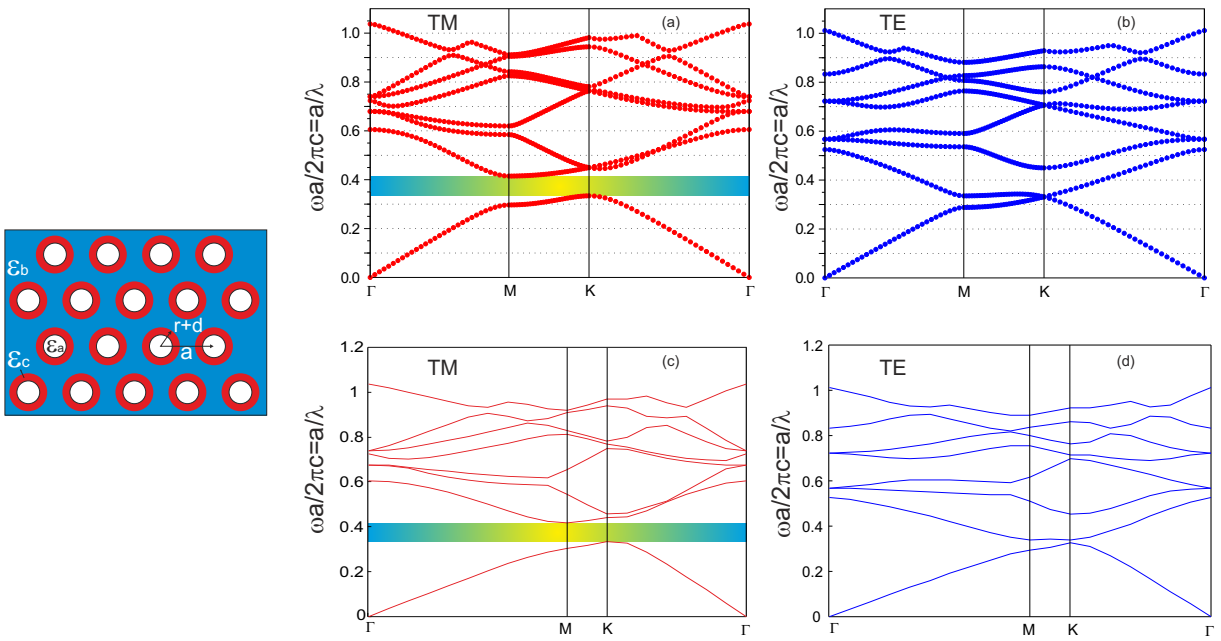


Fig. 2.4 – Structures de bande du CP photonique schématisé à gauche, avec $\varepsilon_c = 2.7725$ et $d = 0.1a$, pour les deux polarisations TM ((a) et (c)) et TE((b) et (d)). (a) et (b) correspondent aux résultats BandSolve, (c) et (d) correspondent aux résultats du code MATLAB.

où f' représente le facteur de remplissage de la couche ε_c dans le milieu. Dans le cas d'un cristal photonique fonctionnalisé par des couches d'épaisseur d, à maille triangulaire, $f' = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{2rd+d^2}{a^2}$, où r correspond au rayon des trous d'air.

La figure 2.5 représente le diagramme de bande obtenue par deux méthodes différentes, pour un cristal photonique de cylindres annulaires et à maille triangulaire, sur un substrat de $LiNbO_3$ et en polarisation TE et TM. La courbe rouge correspond au diagramme de bande obtenu par la méthode des ondes planes en tenant compte des trois milieux séparément. Par contre, la courbe bleu représente le diagramme de bande obtenu en utilisant la méthode de Maxwell-Garnett. On remarque une différence entre les deux résultats et ceci affecte la BIP. La méthode développée présente une étude plus fiable, car elle tient compte de la géométrie réelle du motif et des différents indices contrairement au modèle d'approximation qui considère les différents milieux comme un seul ayant un indice effectif déterminé.

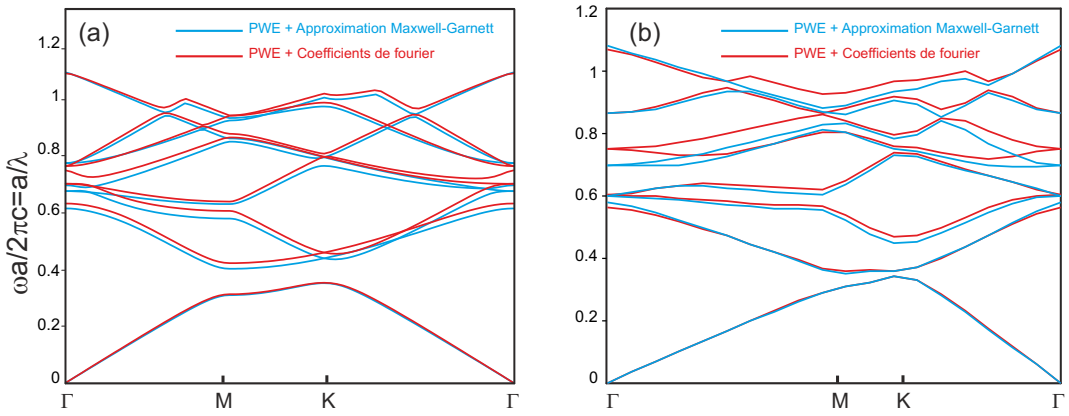


Fig. 2.5 – Structures de bande obtenues par la méthode des ondes planes avec les coefficients de Fourier des équations 2.31 et 2.32 (Rouge) et par l'approximation Maxwell-Garnett (Bleu), en polarisation TM (a) et TE (b).

2.3 Cristaux photoniques avec défauts : Méthode des Supercell

Nous avons jusqu'à présent considéré des structures périodiques 2D parfaites, c'est-à-dire infiniment périodiques sans défauts. Dans cette partie, nous allons décrire la méthode de supercell permettant de déterminer le diagramme de bande des cavités photoniques. Si l'on provoque une rupture locale de la périodicité cristalline, il en résulte l'introduction de " défauts localisés " dans la bande interdite, au même titre qu'un défaut cristallin qui introduit des niveaux d'énergies localisés dans la bande interdite d'un semi-conducteur.

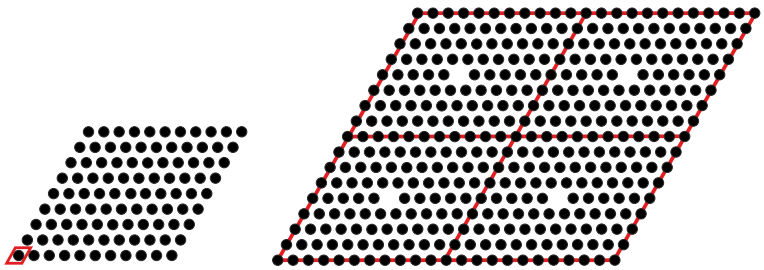


Fig. 2.6 – (a) Cellule étudiée (en rouge) dans le cas d'un cristal photonique 2D simple. (b) Supercell pris en compte dans le cas des cavités photoniques.

Dans un cristal photonique simple où on ne crée pas un mode de défaut, le problème revient à considérer une seule cellule du cristal photonique infinie (Unit-Cell). La pré-

sence d'un défaut exige une approche différente. Clairement, notre domaine doit contenir le défaut. Cette approche revient à définir une 'Supercell', qui consiste en plusieurs Unit-cell. Cette Supercell devient la cellule unité pour notre calcul numérique et les conditions de périodicité sont appliquées sur cette Supercell. Essentiellement, ceci signifie que nous définissons une super-maille contenant le défaut. En raison de la périodicité artificielle introduite par le calcul PWE, ces défauts agiront l'un sur l'autre et peuvent se coupler. Si la largeur, c.à.d la dimension de la Supercell, est assez grande devant l'extension spectrale des modes propres de la cavité, le couplage diminue et chaque défaut sera suffisamment isolé. Dans ce cas le résultat obtenu correspond à un seul défaut indépendant des autres malgré leur présence. L'exemple de la figure 2.6, nous montre le choix de la Supercell (4×4) pris dans le cas d'une maille triangulaire.

Dimension de la Supercell	Fréquence de résonance normalisée
3x3	0.46843
5x5	0.45654
7x7	0.45559
9x9	0.45555
11x11	0.45552
13x13	0.45531

Tab. 2.1 – Tableau donnant les différentes valeurs de la fréquence du mode de cavité pour des simulations de différentes tailles de Supercell

Il est à noter que le choix de la Supercell affecte la symétrie macroscopique du cristal, mais qu'elle a peu d'effet sur la fréquence du mode de défaut. Après le choix de la Supercell, un calcul numérique est fait pour étudier l'influence de la dimension de la supercell sur le diagramme de bande. Le calcul Supercell induit un repliement de bande. Si la périodicité de la supercell est de n×m fois la cellule unité, alors chaque bande sera repliée en n×m bandes puisque la première zone de Brillouin est réduite en dimension d'un facteur n×m. Une étude de convergence de la méthode de supercell est réalisée pour déterminer la dimension la plus grande donnant des résultats fidèles. En même temps, cette dernière doit être minimale pour réduire le temps de calcul. La figure 2.7 montre les structures de bande, d'une cavité photonique composée de cylindres d'air de rayons r=0.4a dans un substrat de niobate de lithium et avec un défaut de rayon $r_d = 0.2a$, mais avec différentes dimensions

de la Supercell, partant de 3×3 jusqu'à 9×9.

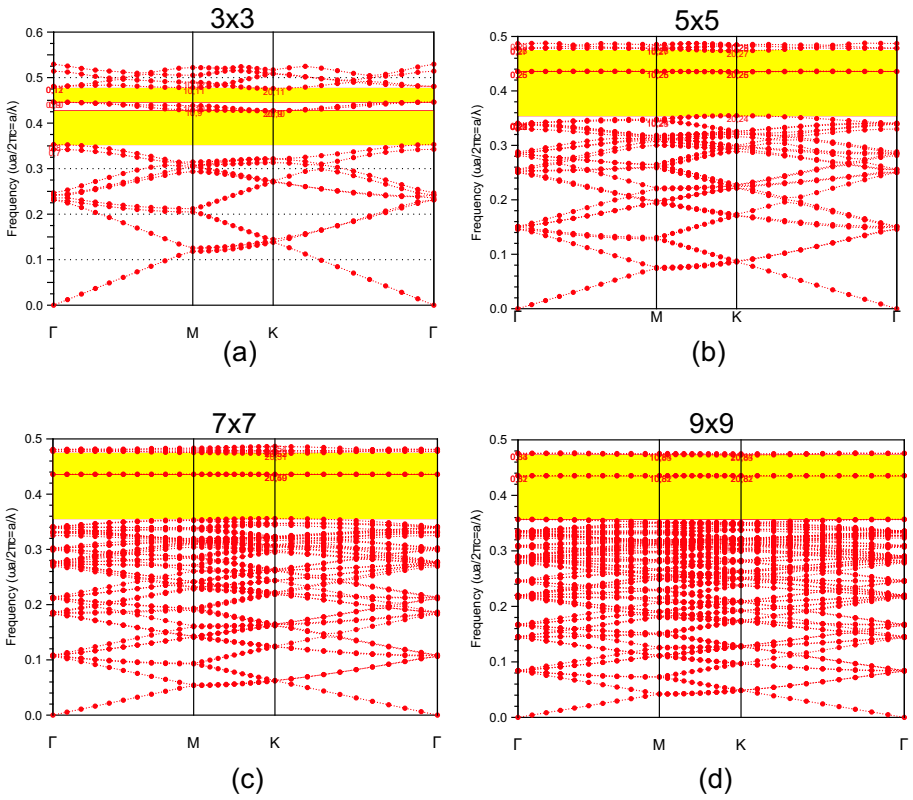


Fig. 2.7 – Structure de bande pour une cavité photonique de type SHD où le rapport $\frac{r}{a}$=0.4 et $\frac{r_d}{a}$=0.2 pour différente taille de supercell. (a)3×3 (b)5×5 (c) 7×7 (d)9×9

L'existence d'un mode plat dans la BIP est une indication classique d e la présence du défaut. Puisque ce mode est spatialement localisé, la même solution, en terme de fréquence, est obtenue pour tous les vecteurs d'ondes appartenant au contour de la zone irréductible de Brillouin. Le mode de défaut devient de plus en plus plat à mesure que la taille de la supercell augmente. C'est un avantage en terme de temps de calcul car ceci permet de restreindre l'étude à un seul point, soit le point Γ. Ainsi, la fréquence du mode de défaut, au point Γ, converge aussi avec les dimensions de la supercell. Dans le tableau 2.1, la valeur de la fréquence normalisée du mode de défaut est indiquée pour chaque taille de la Supercell. De ce tableau, on peut conclure qu'à partir d'une dimension de supercell de 7×7, la fréquence de résonance normalisée converge (elle reste stable à 10^{-4} près). On prendra donc une dimension de supercell de 7×7 pour nos calculs à venir.

2.4 Méthode des différences finies dans le domaine temporel : FDTD

Dans la partie précédente, nous avons étudié des CP-2D à l'aide de la PWE qui est basée sur une résolution dans le domaine fréquentiel. Elle est très efficace pour le calcul de diagramme de bande et elle permet de déterminer rapidement les paramètres géométriques d'une configuration. Mais cette méthode présente quelques points faibles :

- Dans sa version de base elle ne peut pas être utilisée dans le cas de matériaux dispersifs. Dans ce cas, le problème n'est plus un problème aux valeurs propres.
- Au niveau du temps de calcul, elle devient très longue dans le cas de Supercell de dimensions plus que 15×15.
- Elle ne permet pas de déterminer le comportement en transmission et en réflexion dans le cas d'un CP finie.

Dans cette partie nous allons pallier ces difficultés liées à la méthode PWE par la FDTD. Certains détails de la méthode à des fins bien précis. On parlera des conditions aux limites et des PML, de l'insertion du modèle de dispersion de Lorentz dans la FDTD, du calcul des spectres de transmission et de réflexion et de la détermination distribution du champ EM dans le cristal photonique.

2.4.1 Algorithme de la méthode FDTD

Les deux équations vectorielles de Maxwell 2.10 et 2.11 s'écrivent, en coordonnées cartésiennes, sous la forme de six équations scalaires. Les équations 2.34, 2.35 et 2.39 correspondent à la polarisation TM ($\overrightarrow{E_x}$, $\overrightarrow{E_y}$, $\overrightarrow{H_z}$), et Les équations 2.36, 2.37 et 2.38 correspondent à la polarisation TE ($\overrightarrow{E_z}$, $\overrightarrow{H_x}$, $\overrightarrow{H_y}$), et qui sont représentées sur la figure 2.8.

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}\right) \tag{2.34}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}) \tag{2.35}$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}) \tag{2.36}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu}(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}) \tag{2.37}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu}(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}) \tag{2.38}$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu}(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}) \tag{2.39}$$

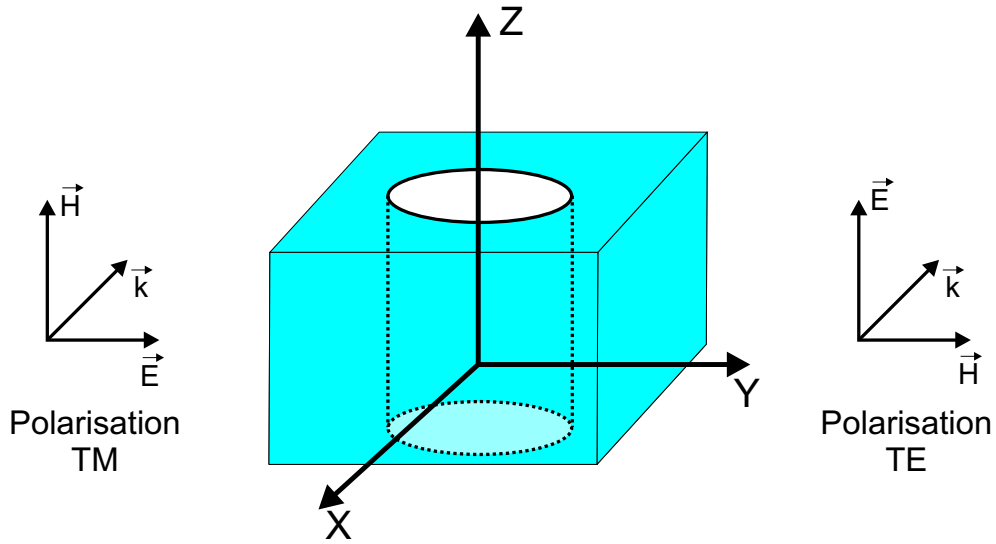


Fig. 2.8 – Schéma représentatif de la polarisation dans un cristal photonique où Z correspond à l'axe des trous et (XY) est le plan du cristal photonique.

Ces équations décrivent une situation où un changement temporel au niveau du champ électrique $\overrightarrow{E}$, dépend d'une variation spatiale du champ magnétique $\overrightarrow{H}$, et vice versa. La FDTD permet de résoudre les équations de Maxwell en les discrétisant via les différences

finies centrées dans le temps et dans l'espace et d'obtenir numériquement les solutions de ces équations. La méthode la plus utilisée est basée sur un algorithme proposé par K.S. Yee en 1966 [56]. Les équations de Maxwell sont remplacées par un système d'équations qui relient le champ électromagnétique de chaque cellule aux champs des cellules voisines. Chaque point de l'espace est alors décrit par une cellule élémentaire, et la structure étudiée devient une juxtaposition de cellules formant ainsi le maillage spatial Δx, Δy et Δz. La figure 2.9 montre que les composantes des champs $\overrightarrow{E}$ et $\overrightarrow{H}$ d'une même cellule sont entrelacées suivant les trois dimensions de l'espace. En plus, le temps est divisé en pas Δt. Le calcul temporel des composantes magnétiques est décalé d'un demi pas temporel (n-1/2)Δt sur celui des composantes électriques qui sont calculées tous les nΔt.

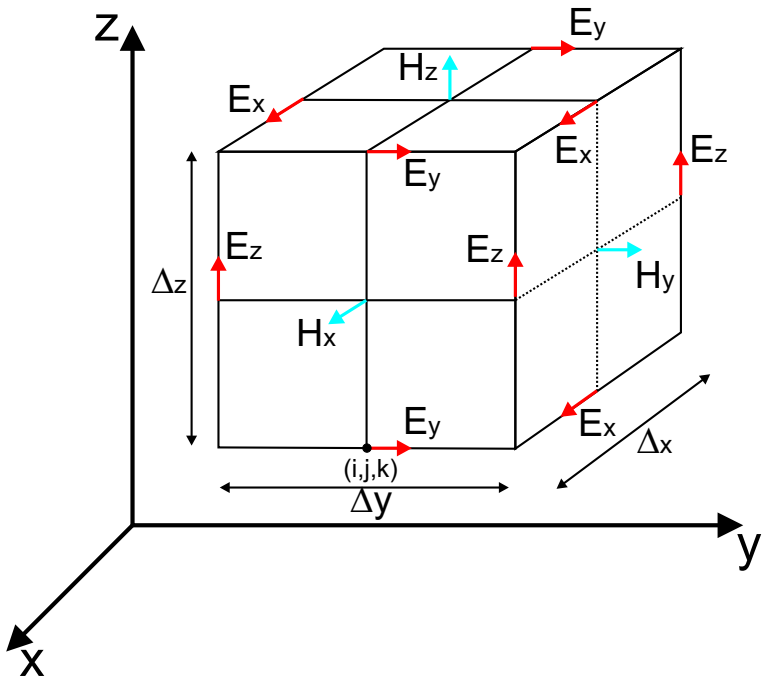


Fig. 2.9 – Cellule élémentaire de Yee

La conséquence de cette méthode est un système de six équations, permettant de décrire les six composantes du champ EM, au niveau d'un point donné et qui sont les suivants :

$$H_x^{n+1/2}(i,j,k) = H_x^{n-1/2}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu}[\frac{E_y^n(i,j,k+1) - E_y^n(i,j,k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i,j+1,k) - E_z^n(i,j,k)}{\Delta y}] \tag{2.40}$$

$$H_y^{n+1/2}(i,j,k) = H_z^{n-1/2}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu}[\frac{E_z^n(i+1,j,k) - E_z^n(i,j,k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i,j,k+1) - E_x^n(i,j,k)}{\Delta z}] \tag{2.41}$$

$$H_z^{n+1/2}(i,j,k) = H_z^{n-1/2}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\mu}[\frac{E_x^n(i,j+1,k) - E_x^n(i,j,k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1,j,k) - E_y^n(i,j,k)}{\Delta x}] \tag{2.42}$$

$$E_x^{n+1}(i,j,k) = E_x^n(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)}[\frac{H_z^{n+1/2}(i,j,k) - H_z^{n+1/2}(i,j-1,k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i,j,k) - H_y^{n+1/2}(i,j,k-1)}{\Delta z}] \tag{2.43}$$

$$E_y^{n+1}(i,j,k) = E_y^n(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)}[\frac{(H_x^{n+1/2}(i,j,k) - H_x^{n+1/2}(i,j,k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1/2}(i,j,k) - H_z^{n+1/2}(i-1,j,k)}{\Delta x}] \tag{2.44}$$

$$E_z^{n+1}(i,j,k) = E_z^n(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)}[\frac{(H_y^{n+1/2}(i,j,k) - H_y^{n+1/2}(i-1,j,k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i,j,k) - H_x^{n+1/2}(i,j-1,k)}{\Delta y}] \tag{2.45}$$

où (i,j,k) sont des entiers naturels qui jouent le rôle de pointeurs des cellules. Cette opération, effectuée en chaque noeud de la grille FDTD (∀i,j,k), est répétée à chaque instant d'échantillonnage temporel pour chacune des six composantes du champ électromagnétique. Pour les points aux bords de la fenêtre de calcul, un traitement numérique spécial est réalisé en utilisant les conditions aux limites. Une des méthodes utilisées est celle des couches absorbantes, la PML, pour perfectly matched layer [57], où deux conductivités électrique et magnétique sont introduites de façon que l'onde arrivant à cet empilement de couche soit totalement absorbée sans induire de réflexions. Ces conditions aux limites sont certainement les conditions absorbantes les plus performantes à l'heure actuelle. Ces conditions partent de la condition d'adaptation d'impédance de deux milieux (PML et fenêtre principale). Au niveau de l'interface la PML présente une conductivité électrique σ et magnétique μ qui doit augmenter progressivement au fur et à mesure que l'on s'éloigne de cette interface. Dans le vide, l'adaptation d'impédance s'exprime par $\frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{\mu}{\mu_0}$. Dans ce cas l'onde n'est pas réfléchie à l'interface entre les deux milieux et s'atténue dans le partie absorbante. L'épaisseur de la couche absorbante peut être choisie aussi grande que nécessaire pour absorber l'onde incidente après réflexion sur les bords extérieurs de la PML.

Bien que la propagation du champ électromagnétique, dans l'algorithme de la FDTD, dépende fortement du pas spatial (Δx, Δy et Δz) et du pas temporel (Δt), le choix de ces paramètres suit une condition spécifique pour que le calcul numérique ne diverge pas. L'expression 2.46, permet de choisir les différents paramètres de maillage pour garantir la stabilité numérique de notre calcul. Dans le cas d'un calcul 2D cette condition s'exprime comme l'indique l'équation 2.47.

$$\Delta t \leq \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{(\Delta y)^2}+\frac{1}{(\Delta z)^2}}} \tag{2.46}$$

$$\Delta t \leq \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{(\Delta y)^2}}} \tag{2.47}$$

Cette condition se comprend assez intuitivement : le temps numérique ne doit pas être plus court que celui réel nécessaire à la propagation de l'onde d'une cellule vers une autre.

En plus du problème d'instabilité numérique, le passage des formes continues et analogiques des équations de Maxwell aux approximations numériques et discrètes, peut engendrer un effet parasite appelé dispersion numérique. Dans la grille FDTD, la vitesse de phase numérique n'est pas égale à celle de la lumière dans le vide. Plusieurs études ont fait l'objet de la dispersion numérique. Il a été démontré par un calcul assez complexe que la dispersion numérique de la vitesse de phase dépend du rapport $\frac{\Delta}{\lambda}$. D'après la référence [58], il est conseillé de mailler très finement la grille de la FDTD, avec un maillage de l'ordre de $\frac{\lambda}{16}$, où λ est la longueur d'onde minimale de l'interval spectral considéré.

2.4.2 Modèle de dispersion de Lorentz dans la FDTD

Dans cette partie nous allons discuter de l'intégration du modèle de dispersion de Lorentz dans le code FDTD pour tenir compte des variations d'absorption au niveau des couches sensibles de notre cristal photonique.

Le contrôle des ondes électromagnétiques à travers un CP nécessite une bonne compréhension de la nature de l'interaction onde-matière sur une large bande spectrale. Pour ceci, il est primordial de tenir compte de la dispersion des matériaux qui composent notre configuration. La dispersion résulte du changement de la constante diélectrique et/ou de

la perméabilité magnétique du matériau avec la fréquence de l'onde électromagnétique. Plusieurs modèles existent pour décrire la dispersion des matériaux comme celui de Drude, Drude-Lorentz, Lorentz,...fonction de la nature du matériau.

Le choix du modèle de Lorentz, dans cette thèse, est lié au fait que le modèle de Drude prend en compte la fréquence plasma des électrons, ce qui est la cas des métaux et non le cas des polymères comme celui de la couche sensible de notre configuration. Dans le modèle de Lorentz la constante diélectrique est exprimée de la façon suivante :

$$\varepsilon_L(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\Delta\varepsilon.\Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2) + \imath\Gamma_L\omega}. \tag{2.48}$$

où ε_∞ est la permittivité électrique pour $\omega \to \infty$, Ω_L est la fréquence de résonance, Γ_L et $\Delta\varepsilon$ représentent respectivement la constante de rappel (pertes ou amortissements) et la force de l'oscillatteur [58]. Les équations de mise à jour des composantes électriques 2.43 font apparaître la permittivité qui dépend explicitement de la fréquence [1] . Pour s'affranchir de cette dépendance fréquentielle on utilise la méthode des accumulateurs récursifs [59].

2.4.3 Illustration de la FDTD dans le cas 2D

La méthode FDTD est surtout utilisée pour simuler la propagation de la lumière dans les structures à base de cristaux photoniques en calculant l'évolution temporelle du champ électromagnétique à tout instant et en tout point appartenant à la fenêtre de calcul. Prenant le cas de la polarisations TM , ainsi les trois équations aux différences centrées résultantes sont les suivants :

$$E_x^{n+1}(i,j) = E_x^n(i,j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j)}[\frac{H_z^{n+1/2}(i,j) - H_z^{n+1/2}(i,j-1)}{\Delta y}] \tag{2.49}$$

[1] La FDTD opère dans le domaine temporel, donc une dépendance fréquentielle n'est pas possible.

$$E_y^{n+1}(i,j) = E_y^n(i,j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j)}[\frac{H_z^{n+1/2}(i-1,j) - H_z^{n+1/2}(i,j)}{\Delta x}] \tag{2.50}$$

$$H_z^{n+1/2}(i,j) = H_z^{n-1/2}(i,j) + \frac{\Delta t}{\mu}[\frac{E_x^n(i,j+1) - E_x^n(i,j)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1,j) - E_y^n(i,j)}{\Delta x} \tag{2.51}$$

Le programme FDTD-2D mis à notre disposition est un code développé au sein de l'équipe nano-optique du département d'optique P.M. Duffieux [60]. Ce code nous permet de calculer la réponse optique (transmission, réflexion, distribution du champ EM, flux du vecteur de poynting,...) d'un CP-2D ou d'une cavité photonique 2D.

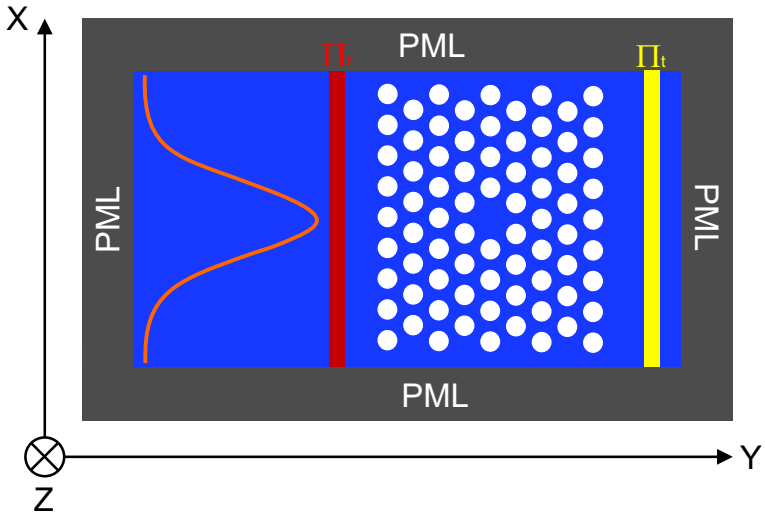


Fig. 2.10 – Fenêtre de calcul FDTD, où π_r et π_t correspondent à deux lignes de détections. La structure est entourée par des couches absorbantes (PML).

La Figure 2.10 représente la fenêtre de travail choisie. L'onde incidente correspond à un faisceau gaussien, en orange sur la figure 2.10, impulsionnel centré sur $\lambda = 900nm$ et ayant une largeur spectrale à mi-hauteur (Beam Waist) de 12500nm. Le plan π_r ; en rouge ; correspond à un plan détecteur permettant d'enregistrer le champ incident ainsi que le champ réfléchi par le cristal photonique. Par contre, le plan π_t ; en jaune ; correspond à un autre plan détecteur destiné à enregistrer le champ transmis à travers le cristal photonique.

Pour déterminer les coefficients de transmission et de réflexion [2] de la cavité photonique. Les champs enregistrés au niveau de π_t et π_r sont normalisés par rapport à ceux du champ incident (2.52 et 2.53). Les deux champs $\overrightarrow{E_T}$ et $\overrightarrow{E_{R+Inc}}$ correspondent, respectivement, au champ transmis et réfléchi à l'ordre zéro de diffraction, stockés sur π_t et π_r respectivement. Le comportement spectral d'une structure est déduit de l'évolution temporelle par une simple transformée de Fourier.

$$T = \left| \frac{\overrightarrow{E_T}}{\overrightarrow{E_{inc}}} \right|^2 \tag{2.52}$$

$$R = \left| \frac{\overrightarrow{E_{R+inc}} - \overrightarrow{E_{inc}}}{\overrightarrow{E_{inc}}} \right|^2 \tag{2.53}$$

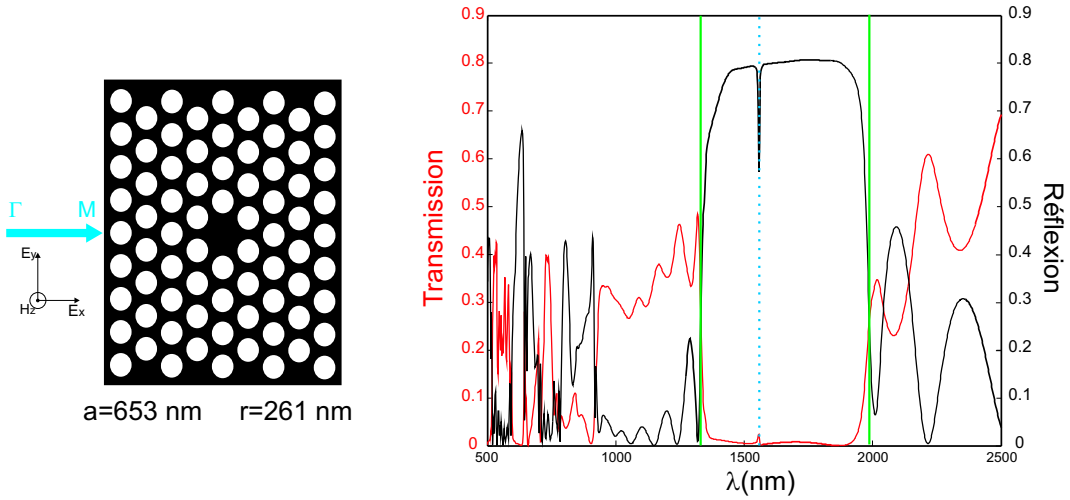


Fig. 2.11 – Spectre de transmission, en rouge, et de réflexion, en noir, obtenus par les calculs FDTD.

Prenons maintenant l'exemple de la structure étudiée avec la méthode des Supercell, où la cavité est de type H_1 ayant une période a=653nm et un rayon des cylindres d'air r=0.4a=261nm. Il s'agit des mêmes paramètres adaptés au cas où le pic de résonance apparaît pour une longueur d'onde $\lambda = 1550nm$. La figure 2.11 montre les deux spectres

[2] On ne considère que le champ se propageant dans la direction moyenne du vecteur d'onde incident (ici, à l'horizontal) ; ce champ correspond donc à l'ordre zéro diffracté transmis ou réfléchi et qui se calcule par une simple valeur moyenne sur tous les points d'un plan (π_t ou π_r).

théoriques de transmission (en rouge) et de réflexion (en noir) de la structure. Nous pouvons remarquer la présence de deux bandes interdites, la première entre [783-917] nm, et la deuxième entre [1332-1987] nm. On remarque aussi sur les deux spectres l'apparition du mode de cavité à l'intérieur de la deuxième bande interdite à une longueur d'onde $\lambda = 1550nm$.

Pour aller un peu plus loin, nous avons décidé de procéder à des simulations pour déterminer la distribution du champ électromagnétique dans la cavité. Grâce au code FDTD fonctionnant en régime permanent ($\lambda = \underline{Cte}$) nous avons calculé la distribution théorique des deux champs $\overrightarrow{E}$ et $\overrightarrow{H}$ à la fréquence de résonance du mode de cavité, puis en dehors et à l'intérieur de la bande interdite photonique.

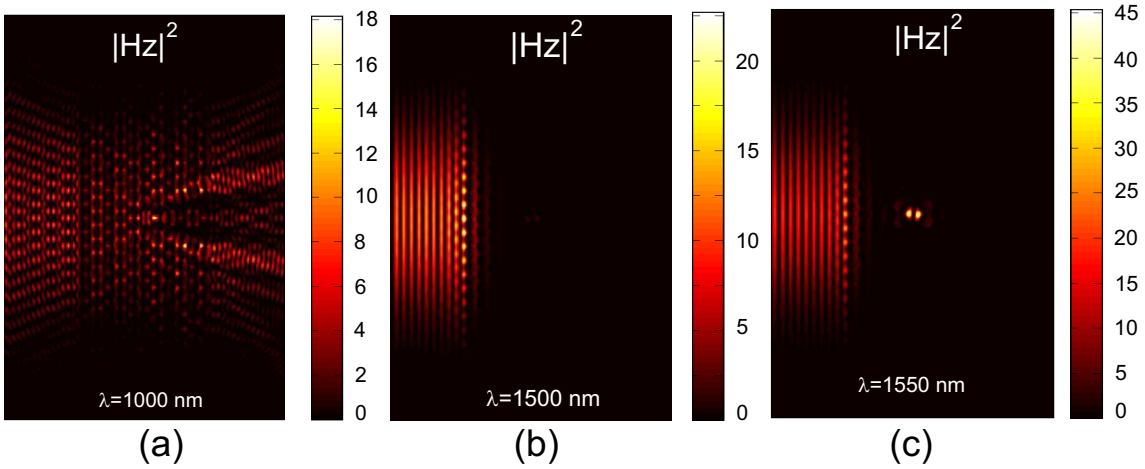


Fig. 2.12 – Résultats FDTD de la distribution du champ magnétique dans la cavité photonique pour différente longueur d'onde. (a) En dehors de la bande interdite à λ=1000nm. (b) Dans la bande interdite à λ=1500nm (hors résonance). (c) A la longueur d'onde de résonance du mode de cavité λ=1550nm.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un modèle pour la méthode des ondes planes qui prend en compte la présence de la très fine couche sensible sur les bordures des trous

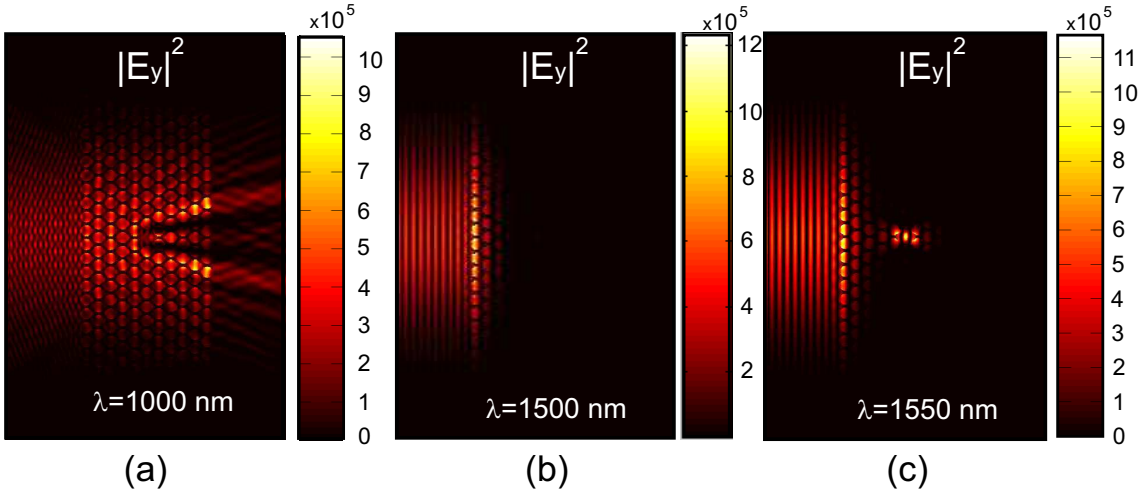


FIG. 2.13 – Résultats FDTD de la distribution du champ électrique dans la cavité photonique pour différente longueur d'onde. (a) En dehors de la bande interdite à λ=1000nm. (b) Dans la bande interdite à λ=1500nm (hors résonance). (c) A la longueur d'onde de résonance du mode de cavité λ=1550nm.

d'un cristal photonique. Puis nous avons vu comment exploiter la méthode "supercell" pour calculer rapidement la structure de bande d'une cavité. Un code FDTD-2D est développé pour étudier les cavités photoniques. Nous avons aussi inséré un modèle de dispersion dans la FDTD pour tenir compte de la dispersion de la couche sensible. Par la FDTD nous avons déterminé aussi la distribution du champ EM dans la cavité pour différente longueur d'onde. Nous allons voir comment la méthode des ondes planes et la méthode des différences finies dans le domaine temporel nous ont servi pour étudier une cavité photonique fonctionnalisée pour l'application comme capteur de gaz.

Chapitre 3

Cavité photonique pour la détection des gaz

Ce chapitre sera consacré à l'étude d'une cavité photonique en tant que structures applicables à la détection des gaz. Ici nous nous intéresserons particulièrement à la réalisation d'un capteur de benzène. Le choix du benzène comme cible à détecter a été motivé par le fait qu'il s'agit d'un polluant présent en quantité importante non seulement dans les atmosphères urbaines mais aussi dans les habitations. Le caractère cancérigène et myélotoxique de ce gaz justifie le développement des techniques de détection en temps réel, sensibles, sélectives et compactes permettant à terme d'évaluer l'exposition des personnes à ce polluant. Notre ambition ici n'est pas de proposer un détecteur de benzène finalisé, mais plutôt de montrer que notre configuration peut notamment être utile à une problématique environnementale d'actualité. Le matériau est, pour cette étude, un substrat de niobate de lithium dopé MgO fonctionnalisé par une couche de porphyrine sélective pour la détection du benzène et ayant un pic d'absorption a $\lambda = 420nm$ [10].

Dans ce chapitre, je décrirai les démarches réalisées pour obtenir les paramètres optimaux de la cavité photonique selon le cahier de charges défini dans le paragraphe **??**. Un des objectifs de l'étude sera de concevoir une cavité dont le pic de résonance coïncide avec le

pic d'absorption des couches sensibles de porphyrine. En premier lieu, une étude théorique par la méthode de supercell combiné avec les nouveaux coefficients de Fourier permettra d'obtenir les paramètres géométriques de la cavité. Ensuite, un traitement avec la méthode FDTD sera décrit, dans lequel un modèle de dispersion de Lorentz est implémenté pour prendre en compte la présence de la couche sensible. De plus, avec la méthode des différences finies nous démontrerons l'influence de la variation de l'absorption de la couche de porphyrine suite à l'adsorption du benzène, sur le mode de résonance de la cavité et sur l'intensité du champ EM dans la cavité.

3.1 Le niobate de lithium dopé oxyde de magnésium - MgO :LiNbO3

Le choix du niobate de lithium (LiNbO3) est motivé par les forts coefficients électro-optiques, acoustiques et non linéaires qui autorisent une modification de l'indice de réfraction, permettant ainsi l'amélioration des performances du capteur (notamment le contrôle du point de fonctionnement). La Figure 3.1 donne une aperçu de la façon dont il sera possible d'exploiter le caractère commandable du niobate de lithium par le biais d'électrodes (Fig. 3.1(a)) ou de peignes inter-digités (Fig. 3.1(b)) qui pourront contrôler (ou moduler) le point de fonctionnement du capteur [61–63].

Le niobate de lithium est un matériau très utilisé dans l'optique intégrée. Il est transparent pour les longueurs d'onde allant de λ=420nm jusqu'à λ=5200nm. Mais il est bien connu, que dans le domaine du visible, ce matériau devient photoréfractif [64]. C'est à dire que son indice de réfraction local sera modifié par l'onde incidente. Pour éviter cet effet on dope le niobate de lithium par de l'oxyde de magnésium. Dans ce cas, le MgO :LiNbO3 est transparent pour les longueurs d'onde allant de λ=300nm jusqu'à λ=5500nm. Nous devons doper le niobate de lithium avec du MgO si nous voulons éviter l'effet photoréfractif dommageable aux performances optiques de nos guides à la longueur d'onde de travail qui sera ici la longueur d'onde d'absorption de la couche de porphyrine λ=420nm.

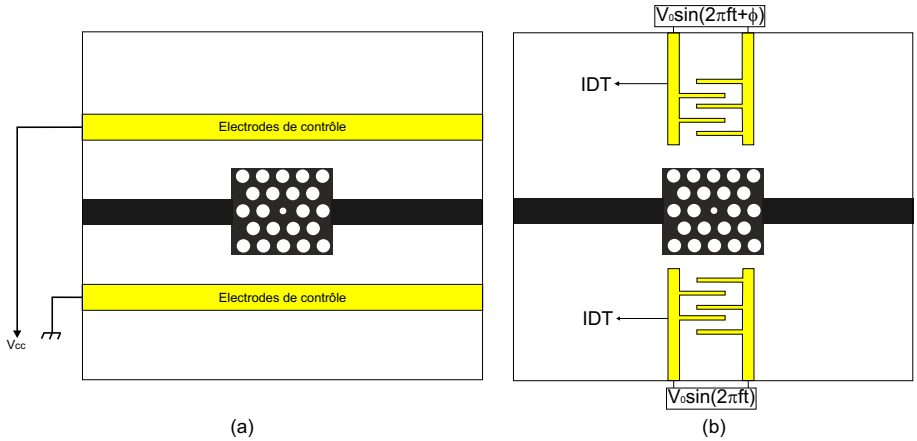


FIG. 3.1 – Exemples d'un crystal photonique commandable : (a) Par effet électro-optique, (b) par l'effet acousto-optique.

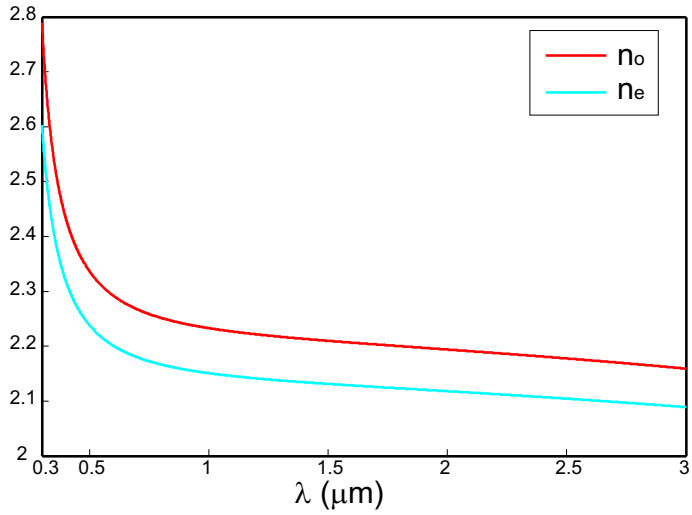


FIG. 3.2 – Variations des deux indices ordinaire (courbe rouge) et extraordinaire (courbe noir) en fonction de la longueur d'onde.

Ce matériau est anisotrope et les équations de Sellemeier [65], données dans 3.1 et 3.2, permettent de décrire les variations de l'indice ordinaire (n_o) et celles de l'indice extraordinaire (n_e) en fonction de la longueur d'onde λ exprimée en micromètre.

$$n_o^2(\lambda) = 4.8762 + 0.11554/(\lambda^2 - 0.04674) - 0.033119\lambda^2 \tag{3.1}$$

$$n_e^2(\lambda) = 4.5469 + 0.094779/(\lambda^2 - 0.04439) - 0.026721\lambda^2 \tag{3.2}$$

L'évolution de l'indice ordinaire (en rouge) et celle de l'indice extraordinaire (en noir) sont représentées sur la figure 3.2. Si on prend l'exemple de la longueur d'onde d'absorption des couches de porphyrine (λ=420nm) le niobate de lithium dopé MgO a les deux valeurs d'indices ; n_o=2.4058 et n_e=2.2962 pour les indices ordinaire et extraordinaire respectivement.

3.2 La porphyrine

La porphyrine représente les couches sensibles et sélectives pour la détection du benzène. Une étude expérimentale réalisée par I. Leray *et al.* montre la variation de l'absorption des couches de porphyrine en présence du benzène. La figure 3.3 représente le spectre d'absorption de la couche de porphyrine pour différentes concentrations du benzène [10].

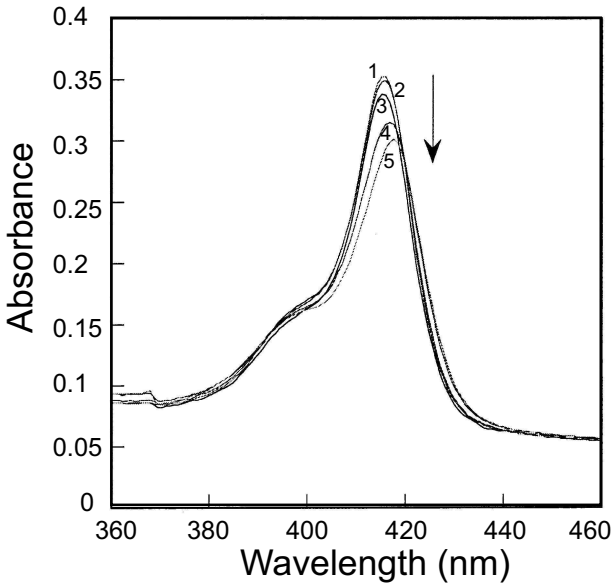


Fig. 3.3 – Spectre d'absorption de la couche de porphyrine tirés de la référence [10] pour différentes concentrations (mmol l^{-1}) :(1) Pas de benzène, (2) 2.7, (3) 5.5, (4) 8, (5) 39.

Le spectre d'absorption expérimental de la porphyrine montre la présence d'un pic d'absorption autour de λ=420nm. Le coefficient d'extinction κ en fonction de la pulsation ω est déduit à partir du spectre de l'absorbance en utilisant la loi de Beer-Lambert et les deux expressions 3.3 et 3.4 donnant la relation entre l'absorbance $\boldsymbol{A}$ et le coefficient d'atténuation linéique α, d'une part, et la relation entre le coefficient linéique α et le coefficient d'extinction κ d'autre part.

$$\alpha = \frac{A}{L \times 0.4343} \tag{3.3}$$

$$\kappa = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} = \frac{\alpha c}{2\omega} = \frac{A \times c}{2 \times L \times 0.4343 \times \omega} \tag{3.4}$$

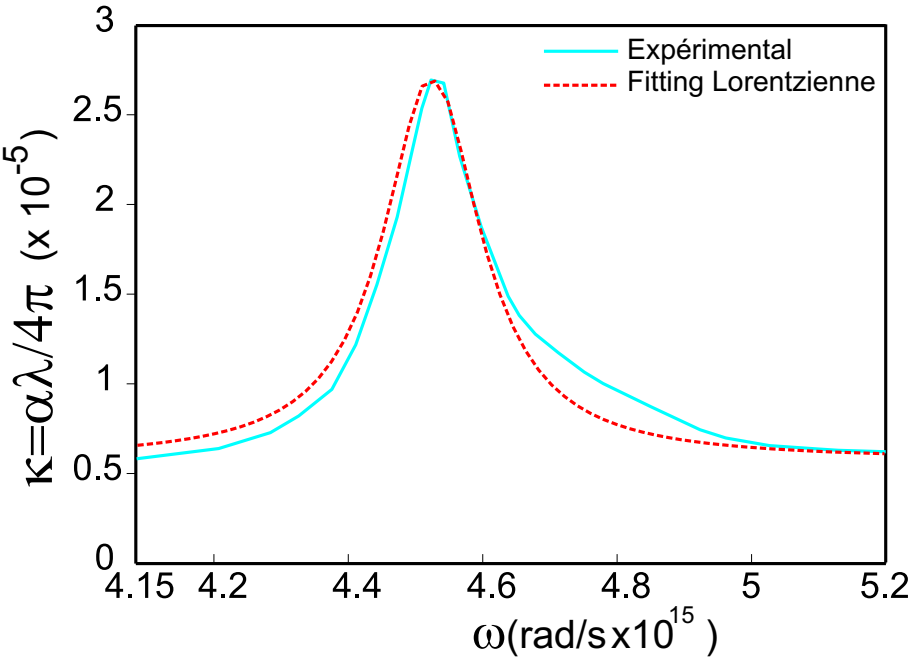


Fig. 3.4 – Coefficient d'extinction en fonction de la fréquence, où la courbe bleu correspond au spectre expérimental et la courbe rouge à son ajustement ("fitting") par une Lorentzienne à travers la méthode des moindres carrés.

Le spectre final donnant le coefficient d'extinction en fonction de la pulsation est donné sur la courbe bleu de la figure 3.4, et la courbe en rouge montre son ajustement (Fitting) par une Lorentzienne en utilisant la méthode des moindres carrés. Ce "fitting" permet de

déduire les paramètres β, ω_0 et Δ définis dans [66] pour une Lorentzienne :

$$\kappa = \frac{\beta}{4}\frac{\Delta^2}{(\omega-\omega_0)^2+\frac{\Delta^2}{4}} - \frac{\beta}{4}\frac{\Delta^2}{(\omega+\omega_0)^2+\frac{\Delta^2}{4}} \tag{3.5}$$

où $\beta = 2.208\times10^{-5}$, la largeur à mi-hauteur $\Delta = 1.7967\times10^{14}$ rad/s et $\omega_0 = 4.5442\times10^{15}$ rad/s est la fréquence de résonance. En utilisant les relations de Kramers-Kronig [66] nous avons pu déduire, à partir de l'expression du coefficient d'extinction κ, celle de l'indice de réfraction. Les variations du coefficient d'extinction κ et de l'indice de réfraction en fonction de la pulsation sont schématisées dans la figure 3.5(a) et (b) respectivement, où la résonance a lieu à w_0=4.5442×10^{15}rad/s, ce qui correspond au pic d'absorption expérimental de la porphyrine.

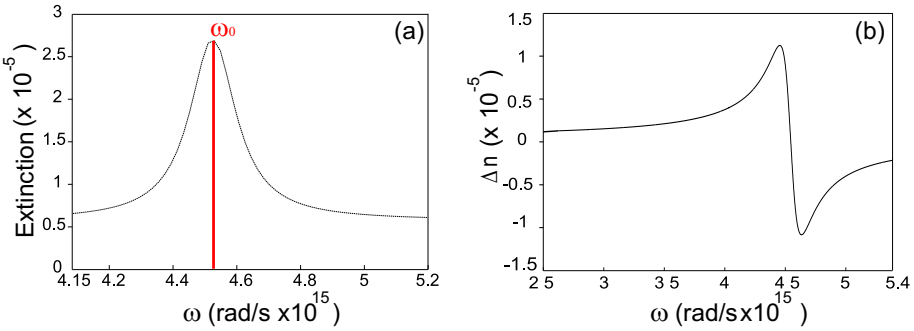


Fig. 3.5 – (a) Variation du coefficient d'extinction (a) et de l'indice de réfraction (b), en fonction de la fréquence.

3.3 La cavité SHD - Etude en PWE

La structure proposée consiste en un cristal photonique de trous d'air à maille triangulaire, où on a introduit un défaut dans la périodicité du cristal : c'est le petit trou que l'on visualise au centre de la structure (cf. 3.6(a)). Si les paramètres géométriques de la structure sont optimisés, elle permet de piéger la lumière dans un volume inférieur à λ^3 induisant ainsi une exaltation de la sensibilité de la cavité aux variations environnementales.

La couche sensible de porphyrine recouvre les faces intérieures des trous d'une épaisseur de quelques nanomètres (zone rouge dans la figure 3.6(b)). La réaction entre la molécule cible (gaz) et la couche est supposée induire des changements dans les propriétés de cette dernière (indice de réfraction, épaisseur et absorption), qui se manifesteront par la variation de l'intensité lumineuse transmise à la fréquence de résonance de la cavité.

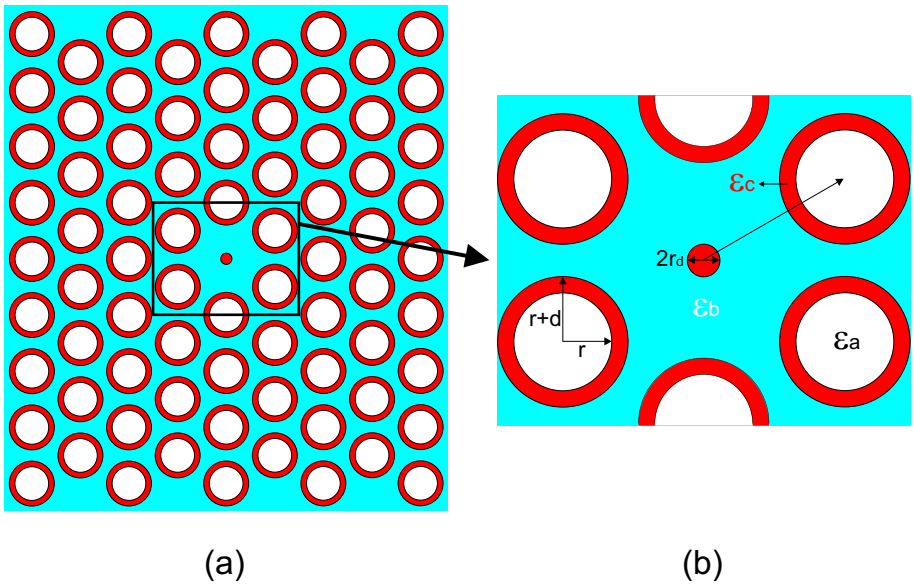


Fig. 3.6 – (a) La cavité SHD étudiée. (b) Zoom sur la région du défaut où r correspond au rayon des trous d'air, d l'épaisseur de la couche, r_d le rayon du défaut et ε_a=1, ε_b=5.319 et ε_c=2.7225 correspondent respectivement à la constante diélectrique de l'air, du MgO : $LiNbO_3$ et de la couche de porphyrine.

En premier lieu, nous avons combiné la méthode des Supercell avec les coefficients de Fourier modifiés dans le cas d'un CP constitué de trois milieux différents, afin de déterminer les paramètres géométriques de notre structure. Rappelons que la structure étudiée consiste en une cavité photonique à maille triangulaire de cylindres d'air tapissés d'une couche sensible de porphyrine d'indice n_c=1.65 où le défaut est introduit en diminuant le rayon d'un trous. L'enjeu maintenant est de déterminer le rayon des trous d'air, le rayon du défaut et l'épaisseur de la couche sensible nécessaires à une détection efficace.

Nous avons étudié la carte de bande interdite, figure 3.7(a), pour une structure à

maille triangulaire sur un substrat de niobate de lithium dopé MgO d'indice de réfraction n=2.3063 correspondant à l'indice effectif des guides d'onde réalisées par échange protonique sur un substrat de MgO :$LiNbO_3$. Le premier choix fixé, est celui du rapport $\frac{r}{a}$=0.4, motivé par le fait que pour cette valeur le rapport correspond à la plus large bande interdite compatible avec les contraintes technologiques. Nous avons montré dans un premier temps que seule la polarisation TM (i.e. polarisation pour laquelle le champ magnétique est parallèle à l'axe des trous) permettait d'obtenir une bande interdite complète.

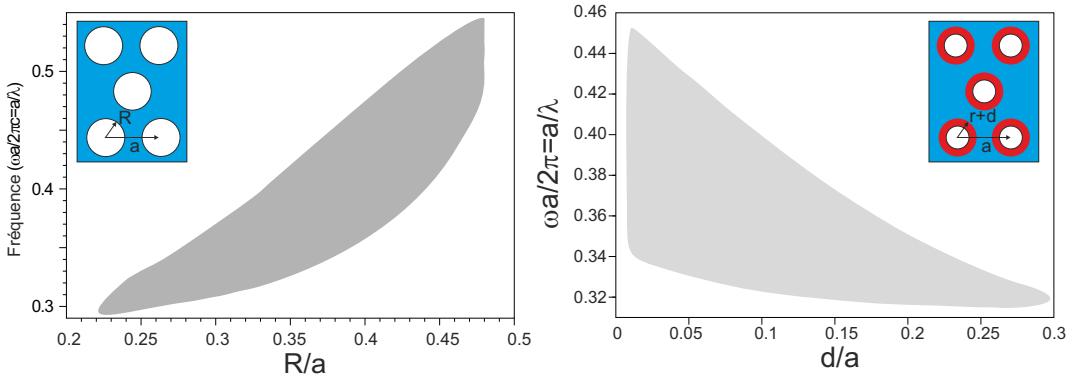


Fig. 3.7 – (a) Carte de bande interdite photonique, obtenue par la méthode PWE, d'un réseau triangulaire de cylindres d'air (ε_a=1) dans un substrat de niobate de lithium dopé MgO(ε_b = 2.3063) en polarisation TM. La zone grise corresponde à la largeur de la BIP, en polarisation TM, pour chaque valeur du rapport $\frac{r}{a}$. (b) Carte de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la couche sensible de porphyrine obtenue par la méthode PWE et en polarisation TM. La zone grise corresponde à la largeur de la bande interdite pour les différentes valeurs de l'épaisseur d de la couche pour $\frac{R}{a}$=0.4.

Après avoir fixé le rapport $\frac{R}{a}$, nous allons déterminer l'épaisseur de la couche de porphyrine, c'est à dire que maintenant on considère que R=r+d où d correspond à l'épaisseur de la couche sensible qui entoure les trous d'air ayant un rayon r. Le code développé, décrit dans le chapitre 2, nous a permis de faire une carte de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la couche d et le rayon des trous d'air tout en visant la bande interdite la plus large possible, restant néanmoins compatible avec les contraintes technologiques. La figure 3.7(b) nous montre la largeur de la bande interdite en fonction de l'épaisseur de la couche de porphyrine et le choix qui semble le plus approprié est pour $\frac{d}{a} = 0.1$ en tenant compte des contraintes technologiques.

Une fois ce rapport est fixé à $\frac{d}{a} = 0.1$, nous avons utilisé la méthode des supercell pour déterminer le rayon du défaut introduit dans le cristal photonique. A noter que la cavité étudiée est de type SHD (Single Hole Defect), où le rayon du cylindre d'air au milieu a un rayon r_d différent de r. La méthode de supercell va nous permettre de déterminer ce rayon tout en respectant les contraintes technologiques et en visant un mode de cavité à une longueur d'onde $\lambda = 420nm$ qui correspond au pic d'absorption de la porphyrine. La dimension choisie dans le calcul est de 9×9, contenant le défaut et qui suffisante pour éviter le repliement de bande et pour avoir une valeur stable de la fréquence du mode de cavité (cf. calculs de convergence au chapitre 2).

Par ailleurs, nous nous sommes fixés comme contrainte technologique de ne pas avoir des rayons de trous d'air supérieurs à 0.3a, sinon les frontières entre trous s'effondrent, et il ne reste plus qu'une piscine à l'issue de la gravure. Les calculs par la méthode de supercell nous ont permis d'aboutir aux paramètres suivants, destinés à obtenir un mode de cavité au milieu de la bande interdite, tout en respectant les contraintes technologiques : d=0.1a, r=0.3a et r_d=0.1a où 'a' est la période du cristal photonique. La structure finale est schématisée sur la figure 3.6(a) et (b), et la structure de bande obtenue par la méthode de supercell, figure 3.8(a), montre la présence du mode de cavité dégénéré dans la bande interdite à la fréquence $\frac{a}{\lambda}$=0.3761 (figure 3.8(b)). Avec cette valeur de fréquence normalisée pour le mode de cavité, on en déduit les différents paramètres de la structure pour une longueur d'onde de résonance λ=420nm : a=158nm, r=48nm, d=r_d=16nm.

La sensibilité de la cavité à la variation de l'épaisseur de la couche de porphyrine est ensuite étudiée par la méthode des Supercell. Les résultats sont présentés dans la figure 3.9 : ils montrent que la fréquence de résonance croît avec l'épaisseur de la couche. Plus précisément, on peut conclure qu'une variation de l'épaisseur de 0.04a induit un shift de $16 \times 10^{-3} \frac{c}{a}$ de la fréquence de résonance. Cela revient à dire qu'une variation de l'épaisseur de 1 nm de la couche sensible implique un décalage de 0.5nm du pic de résonance [67], ce qui est tout à fait comparable aux résultats recensés dans la littérature sur ce type de cavité [36]. En présence de benzène, on peut donc espérer un shift du pic de résonance, lié à

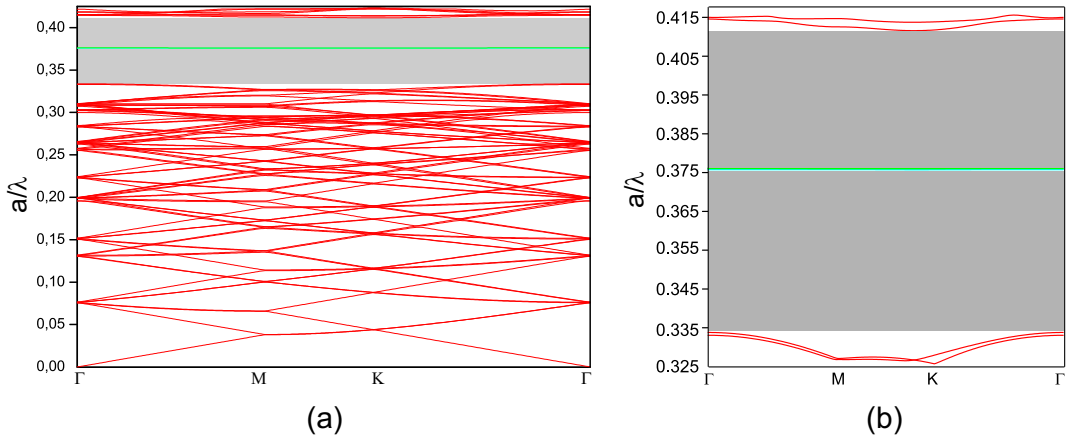


Fig. 3.8 – Structure de bande de la structure étudiée obtenue par la méthode de supercell où le mode de résonance qu'apparaît dans la bande interdite à $\frac{a}{\lambda}$=0.3761.

la légère variation de l'épaisseur de la couche sensible. Néanmoins, on peut encore accroître cette sensibilité en s'appuyant sur l'exploitation de l'absorption de la couche sensible.

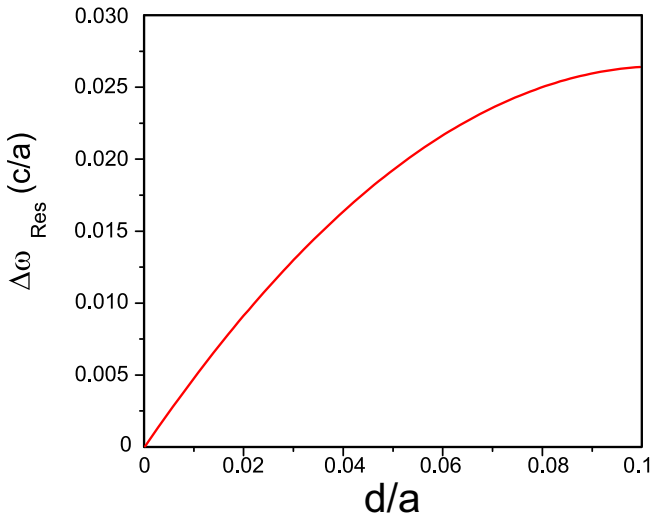


Fig. 3.9 – courbe du shift du mode de cavité en fonction de l'épaisseur de la couche.

3.4 Etude de la couche de porphyrine - Modèle de Lorentz

Le but maintenant est d'étudier le comportement de la couche de porphyrine en présence du benzène, et essayer de déterminer les paramètres de dispersion de Lorentz pour les intégrer dans les simulations FDTD. L'objectif est de déterminer l'effet de l'absorption sur la position et l'amplitude de la résonance. Pour atteindre ce but, il nous faut étudier les variations maximales de la partie imaginaire de la constante diélectrique et la variation de l'indice de réfraction de la couche sensible.

Après avoir déterminer analytiquement les variations de κ et de n expérimentales (cf. paragraphe 3.2), nous allons déterminer les paramètres du modèle de dispersion de Lorentz décrit par l'équation 3.6, pour l'implémenter dans le code FDTD dans le cas où la porphyrine n'a pas adsorbé les molécules de benzène.

$$\varepsilon_L(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\Delta\varepsilon.\Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2) + \imath\Gamma_L\omega} \tag{3.6}$$

Où $\varepsilon_\infty = n_0^2$=2.7225. Les parties réelle et imaginaire de ε_L, exprimées à la fréquence de résonance (à $\omega = \Omega_L$) dans les équations 3.7 et 3.8, seront ajustées aux courbes obtenus pour n et κ expérimentales. Les paramètres d'ajustement, dans le cas où on a pas de gaz dans le milieu, sont donnés dans le tableau 3.4. La dépendance en fréquence de l'indice de réfraction montre un variation maximale de 10^{-5}.

$$Re(\varepsilon_L(\omega)) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\varepsilon_\infty + \sqrt{\varepsilon_\infty^2 + \frac{\Delta\varepsilon^2.\Omega_c^2}{\Gamma_L^2}}\right)} \tag{3.7}$$

$$Im(\varepsilon_L(\omega)) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(-\varepsilon_\infty + \sqrt{\varepsilon_\infty^2 + \frac{\Delta\varepsilon^2.\Omega_c^2}{\Gamma_L^2}}\right)} \tag{3.8}$$

L'adsorption des molécules de benzène par la couche de porphyrine provoque un changement de l'intensité et de la position du pic d'absorption de la couche. On procède de la même façon que précédemment pour déterminer les paramètres du modèle de dispersion de Lorentz qui s'ajustent aux courbes expérimentales en présence de benzène. On déduit de cette étude que le seul paramètre qui change sensiblement en présence de benzène est le coefficient de rappel $\Delta\varepsilon$. Cette relation, entre la concentration du benzène et $\Delta\varepsilon$, est estimée du référence [10]. En absence de benzène, $\Delta\varepsilon$ est estimé à 8.6×10^{-6} alors qu'il devient 7.7×10^{-5} en présence de 45ppm de benzène.

Modèle de dispersion	Fréquence de résonance	FWHM	$\Delta\varepsilon$
Modèle de Lorentz	Ω_L=4.534×10^{15}rad/s	Γ_L=2×10^{14}rad/s	$\Delta\varepsilon$=0.086×10^{-4}

Tab. 3.1 – Paramètres du modèle de dispersion de Lorentz décrit dans 3.6.

3.5 La cavité SHD - Etude en FDTD

Un calcul FDTD-2D est effectuer pour déterminer l'effet induit sur le mode de cavité. Ces calculs FDTD prennent en considération des trous infinis suivant z, ce qui expérimentalement correspond à une profondeur typique de l'ordre de six fois le diamètre des trous [68]. La structure finale étudiée, schématisée dans la figure 3.10(a), est créée à laide d'un code MATLAB et ensuite implémentée dans le programme FDTD suivant une distribution de la constante diélectrique. La cavité est ensuite modélisée en injectant un faisceau gaussien de largeur à mi-hauteur $W_0 = 2\mu m$, centré à 420nm et ayant une largeur temporelle permettant le calcul de la transmission sur une large bande spectrale en utilisant une simple transformée de Fourier.

Dans le but de décrire les couches de porphyrine et les trous d'air , nous avons utilisés la technique de sous-maillage [69]. Ceci revient à effectuer avant le calcul FDTD un maillage n fois plus fin que celui utilisé dans le code FDTD. Ainsi, chaque point de l'objet final est décrit par une matrice de n×n points. Une période du cristal photonique est donc initialement discrétisée avec (20×82)×(20×41) points. Après cela, nous calculons une moyenne de

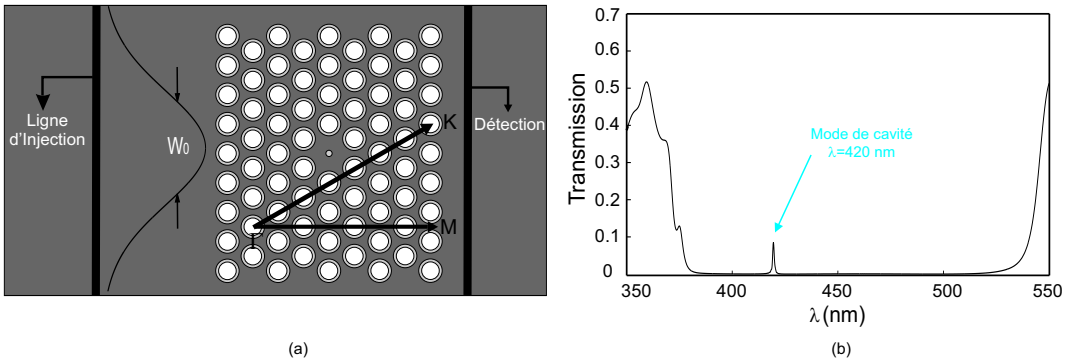


Fig. 3.10 – (a) Cavité SHD étudiée en FDTD, où l'onde incidente est suivant la direction ΓM. (b) Spectre de transmission de la cavité SHD où le pic de cavité est obtenue pour λ=420nm.

la permittivité diélectrique sur 20×20 points dans le but d'obtenir 82×41 points pour une période dans le calcul FDTD, ce qui a pour conséquence de lisser la constante diélectrique au niveau des discontinuités sans changer la structure initiale. Les simulations sont faites pour une polarisation TM et pour une onde incidente suivant la direction ΓM. Le spectre de transmission de la cavité photonique est montré sur la figure 3.10(b). Les calculs ont été réalisés pour les longueurs d'onde partant de λ=350nm jusqu'à λ=550 nm. La figure 3.10b montre l'apparition du mode de cavité dans la bande interdite à la longueur d'onde souhaitée λ=420 nm. Le facteur de qualité Q de la cavité est estimé à 700. Un tel facteur de qualité n'est pas assez satisfaisant pour la détection des petites variation d'indice de réfraction si on s'appuie sur une mesure du shift en longueur d'onde du pic de résonance [70], mais dans notre cas on s'intéresse plutôt à l'effet de l'absorption des couches sur le coefficient de transmission du pic de résonance de la cavité et non au déplacement de ce dernier.

Après avoir analysé dans la partie précédente les couches de porphyrine et montré comment modifier le modèle de Lorentz pour tenir compte de la présence du benzène dans le milieu pour différentes concentrations, nous allons par la suite insérer ce modèle pour différents cas dans le code FDTD et évaluer l'effet de l'absorption de la couche de porphyrine suite à l'adsorption du benzène. Comme c'est démontré dans le paragraphe précédent que la présence du benzène dans le milieu induit une variation du coefficient de rappel $\Delta\varepsilon$: plusieurs calculs FDTD sont réalisés pour différentes valeurs de $\Delta\varepsilon$. Par conséquent,

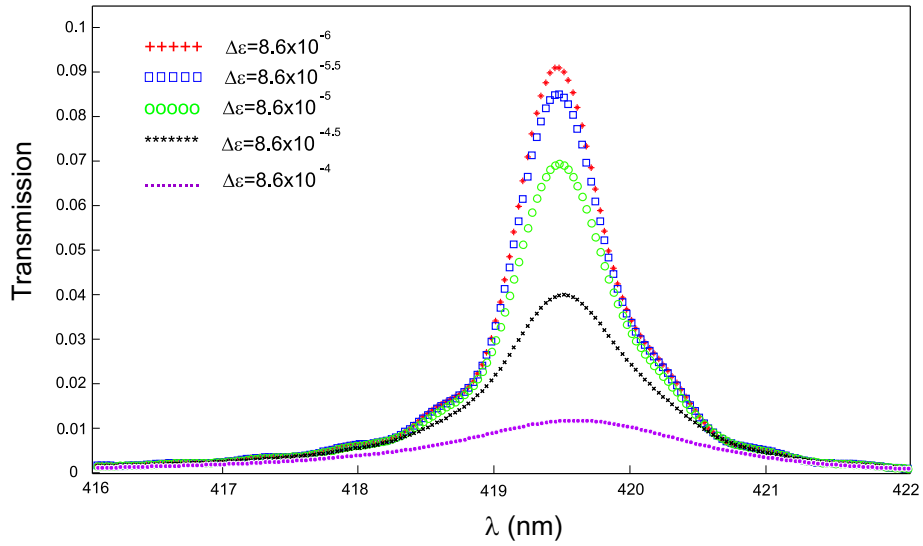


Fig. 3.11 – Variation du coefficient de transmission du mode de cavité en fonction de la variation de $\Delta\varepsilon$ qui corresponde à différentes valeurs de concentration de benzène dans le milieu.

l'amplitude et la position du mode de cavité sont affectés. La figure 3.11 représente le mode de cavité pour différentes valeurs de $\Delta\varepsilon$ variant de 8.6×10^{-6} (cas où il n'y a pas de benzène dans le milieu), jusqu'à 8.6×10^{-4} (cas où la concentration du gaz dans le milieu est de 500ppm) avec un facteur de $10^{0.5}$. Le coefficient de transmission du mode de cavité en fonction de sa position est donné dans la figure 3.12(a), et en fonction du coefficient de rappel $\Delta\varepsilon$ dans la figure 3.12(b).

Une autre étude réalisée à partir du code FDTD nous a permis de retrouver le comportement du champ EM dans la structure dans le cas où les molécules sont adsorbées par les couches sensibles. La figure 3.13, montre la distribution des deux champs électrique et magnétique dans la structure à la longueur d'onde de résonance de la cavité λ=420 nm.

Les figures 3.13(a) et (d) représentent la distribution du champ magnétique dans la cavité, dans le cas où on n'a pas de benzène, $\Delta\varepsilon=8.6\times10^{-6}$, dans le milieu et dans le cas ou il y a 5000 ppm de benzène, $\Delta\varepsilon=8.6\times10^{-3}$, respectivement. Comme l'indiquent les deux images, le champ magnétique est confiné autour du défaut. Les figures 3.13 (b)(c) et (e)(f)

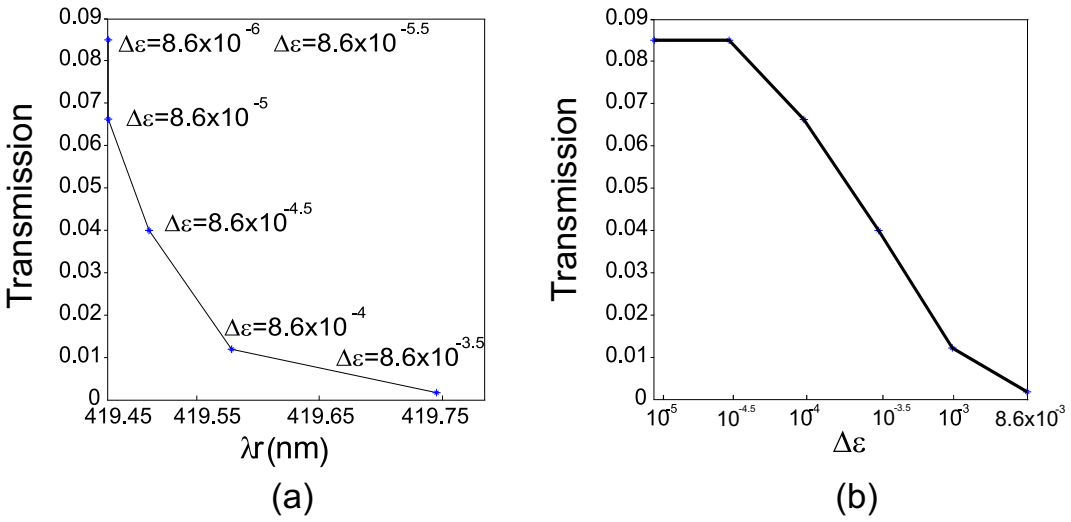


Fig. 3.12 – (a) Transmission en fonction de la position du mode de cavité où on peut observer un shift vers le rouge lorsque $\Delta\varepsilon$ croît. (b) Transmission à travers le CP en fonction de $\Delta\varepsilon$.

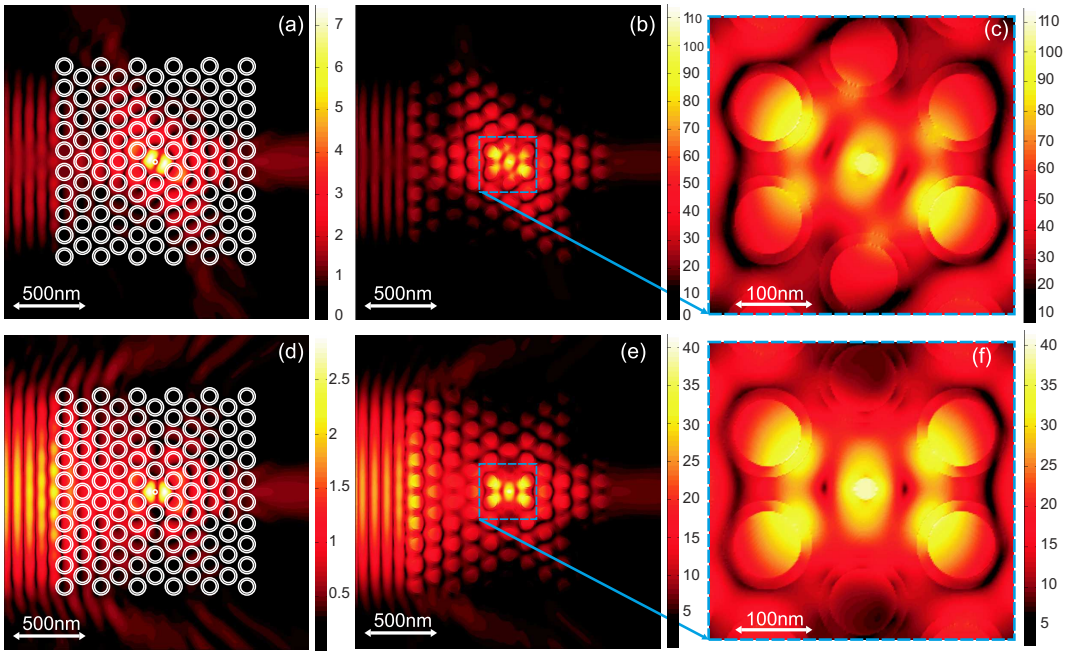


Fig. 3.13 – (a) et (b) représentent respectivement la racine carré de l'amplitude du champ électrique et magnétique sans tenir compte l'effet de l'absorption des couches. (d) et (e) représentent ceux pour $\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-3}$ (5000 ppm de benzène). (c) et (f) Zoom au niveau du défaut dans le cas du champ électrique.

représentent la distribution du champ électrique pour les mêmes cas. On remarque que le champ électrique est totalement confiné dans le défaut complètement rempli de porphyrine. Notons que les champs montrés, représentent la racine carré de l'amplitude du champ considéré. De ces calculs on peut déduire que l'intensité du champ EM local diminue d'un facteur de 60 lorsque la sonde détecte 5000 ppm de benzène [67]. Cette valeur de 5000 ppm n'est pas assez réelle, mais le choix de telle valeur est pour souligner l'influence de l'absorption sur la distribution de l'intensité du champ électromagnétique dans la cavité photonique.

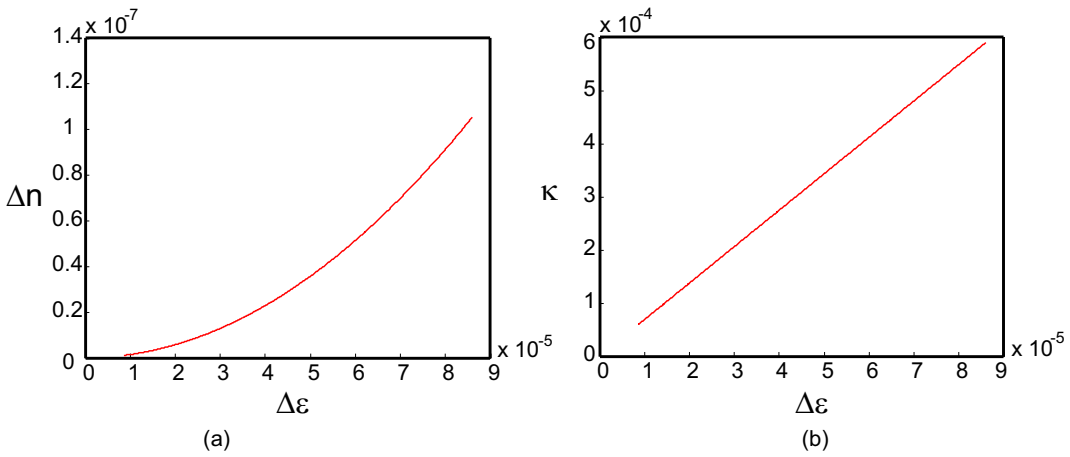


Fig. 3.14 – Variations de l'indice de réfraction en (a)et du coefficient d'extinction, en (b), en fonction de $\Delta\varepsilon$.

A partir de ces résultats on peut conclure que lorsque $\Delta\varepsilon$ varie de 8.6×10^{-6} à 8.6×10^{-4}(50 ppm de benzène), cela entraîne une variation du coefficient de transmission du mode de cavité de 23%. Notons que cette variation se traduit aussi par une variation d'indice de 10^{-7} et une variation du coefficient d'extinction de 6×10^{-4}. La variation de $\Delta\varepsilon$ est en effet répercutée sur le coefficient d'extinction et sur l'indice de réfraction comme le montre les deux équations 3.7 et 3.8. Les variations Δn et $\Delta\kappa$ en fonction de $\Delta\varepsilon$ sont montrées sur les figures 3.14(a) et (b) respectivement. Par conséquence, en considérant que la plus petite variation de transmission détectable est de 1%, on peut déduire que la plus petite concentration de benzène détectable est de 2.3 ppm. Cette valeur dépend fortement des performances de la couche sensible, et ne doit être considérée ici que comme un indicateur approximatif des performances de notre structure.

3.6 Conclusion

Nous avons étudié une cavité photonique de type SHD fonctionnalisée par des couches sensibles de porphyrine et spécifiques pour la détection du benzène. Cette étude théorique, réalisée par les deux méthodes développées dans le chapitre précédent, nous a permis d'étudier l'effet de l'absorption de la couche sensible sur la réponse spectrale de la cavité. On a démontré que quand l'effet de l'absorption de la couche augmente, l'intensité du pic de résonance diminue.

Une telle étude présente une application originale pour des capteurs biochimiques, où les molécules à détecter peuvent être adsorbées par une couche spécifique. Cette réaction physico-chimique mène à un changement de l'absorption et l'indice de réfraction de la couche, accompagné par un changement des paramètres du cristal photonique (rayon, épaisseur). Une telle étude exige un ajustement de l'absorption des couches pour qu'elle coïncide avec le pic de résonance de la cavité photonique où l'effet de l'absorption est détectable. Pour vérifier la faisabilité expérimentale de cette structure photonique pour le visible, l'étude théorique a été suivie par une réalisation de la cavité en utilisant une technologie de gravure par faisceau d'ions focalisé, un procédé de fabrication qui sera décrit plus tard. La figure 3.15 représente une image MEB de la cavité réalisée en salle blanche où le rayon de défaut est $r = 20nm$, la période du cristal photonique est $a = 160nm$ et un rayon des trous $R = 50nm$.

Pour valider le fonctionnement des cavités photoniques en niobate de lithium, un sujet non abordé auparavant, nous ramène à l'étude de ces structures pour une longueur d'onde de résonance λ=1550 nm tenant compte de la maîtrise de fabrication des guides d'ondes pour cette longueur d'onde à l'institut FEMTO-ST. Ainsi, toute la partie suivante, théorique et expérimentale, sera consacrée à l'étude de faisabilité des cavités photoniques en niobate de lithium, ayant un mode de résonance à $\lambda = 1550nm$.

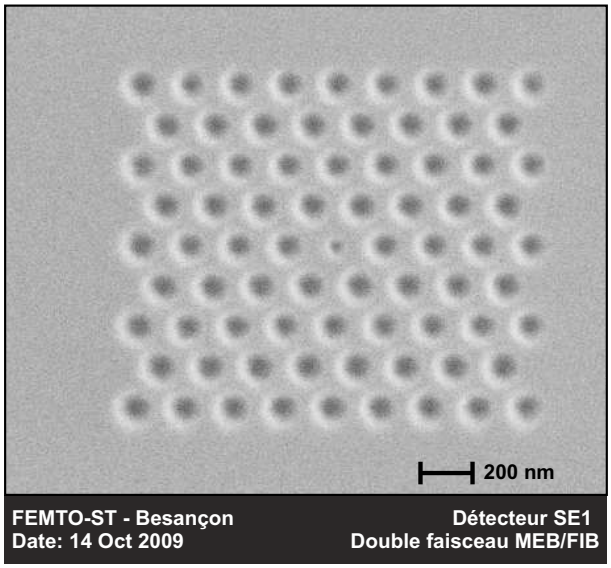


Fig. 3.15 – Image MEB d'une cavité SHD avec $r = 20nm$, $R = 50nm$ et $a = 160nm$.

Chapitre 4

Cavités photoniques : Etude théorique et expérimentale

Dans ce chapitre, les cavités photoniques en niobate de lithium seront étudiées théoriquement et expérimentalement pour démontrer, pour la première fois, la faisabilité de ces structures sur un tel matériau. La première partie sera consacrée à la description du niobate de lithium, de ses propriétés et des guides d'ondes réalisés sur ce matériau. Ensuite, nous discuterons de la fabrication des cavités photoniques par une gravure directe par faisceau d'ions focalisé. La troisième partie sera consacrée à l'étude théorique par la méthode de supercell et par FDTD des cavités SHD et H1 à 1550 nm, pour lesquelles on déterminera les différents paramètres géométriques avant la phase de fabrication. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous exposerons les résultats expérimentaux obtenus en champ lointain et en champ proche. Nous montrerons des résultats en transmission et en réflexion, ainsi que des résultats exploitant le SNOM pour évaluer la distribution du champ dans les cavités.

4.1 Le niobate de lithium : Généralités et guides d'onde

Le niobate de lithium ($LiNbO_3$) est un matériau diélectrique dont l'utilisation est très répandue dans les télécommunications, l'optique intégrée (modulateurs de type Mach-Zender, guides d'ondes optiques), l'optoélectronique et la photonique. L'application de ce matériau dans le domaine de la nanophotonique est motivée par ses propriétés électro-optiques, acousto- optiques, non linéaires et piézoélectriques. Depuis quelques années, ce matériau a suscité l'intérêt de la photonique en particulier pour la réalisation de nouveaux composants optiques miniatures dont les fonctions seraient "commandées" par le contrôle des propriétés physiques et optiques du niobate de lithium. De plus, la croissance cristalline du niobate de lithium et les techniques de dopage (Er [71, 72], Ti [73]) sont bien maîtrisées. Ce matériau est un cristal de synthèse obtenu par croissance selon la technique Czochralski, développée dans les années 60 qui consiste en un tirage à partir d'un bain de LiO_2 et de Nb_2O_5 [74–76].

Dans un premier temps, nous présenterons les principales propriétés physiques du niobate de lithium telles que la valeur de ses différents coefficients, sa structure cristalline et ses propriétés optiques. Afin de confiner la lumière, il est nécessaire de réaliser des guides dans le matériau. Pour cela, il existe deux principales méthodes que nous présenterons dans la deuxième partie.

4.1.1 Propriétés

Le niobate de lithium a une structure cristalline rhomboédrique appartenant au groupe de symétrie "3m" et est décrite comme un empilement de plans composés chacun de trois atomes d'oxygène où deux plans forment un octaèdre. L'arrangement des cations au sein des octaèdres se présente sous la forme d'une séquence Nb, libre, Li, Nb, libre, Li comme le schématise la figure 4.1. Cette structure cristalline rend le matériau uniaxial au niveau optique. Il possède donc deux indices de réfraction, un ordinaire (n_o) et l'autre extraordinaire (n_e). Les valeurs de ces indices sont supérieures à 2 dans la gamme spectrale de transparence. La biréfringence de ce matériau, définie par $n_o - n_e$, varie selon la fréquence

de l'onde se propageant dans le matériau.

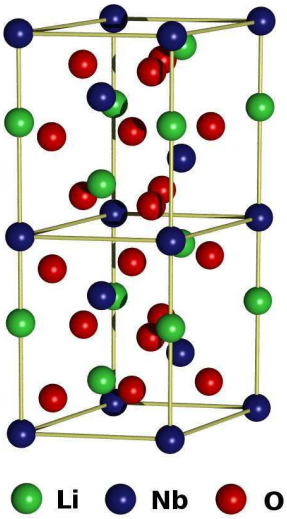


Fig. 4.1 – Structure cristalline du niobate de lithium.

Les propriétés optiques du niobate de lithium sont exposées dans le tableau 4.1. Nous remarquons en particulier les forts valeurs des coefficients non linéaire d_{33} et électro-optique r_{33}.

4.1.2 Les guides d'ondes sur $LiNbO_3$

Il existe plusieurs techniques de fabrication de guides d'ondes optiques sur $LiNbO_3$. Parmi les plus utilisées, on peut citer l'échange protonique [77–79] et la diffusion de titane [80,81]. Les guides obtenus par diffusion titane reposent sur l'augmentation de l'indice de réfraction du substrat de $LiNbO_3$ dans la région de présence des ions Ti^{4+}. La variation d'indice locale est d'autant plus importante que la concentration de titane est élevée : le guide obtenu est un guide à gradient d'indice. Pour obtenir un guide diffusé titane (figure 4.2), on commence par déposer une résine photosensible à la tournette sur le substrat. Les motifs des guides sont définis à l'aide d'une lithographie UV : on utilise une résine inversée (Ti09Xr par exemple), dont une partie sera cachée par le motif des guides au cours de l'insolation UV. Après développement, la résine reste partout sauf au niveau des motifs des guides. Une couche de titane de 10 à 100 nm est alors déposée sur la résine développée

Propriétés et coefficients	**Caractéristiques des wafers** $LiNbO_3$
Plage de transparence	$0.35\mu m$ à $4.5\mu m$
Densité(g/cm^3)	4.65
Masse molaire (g/mol)	147.846
Point de fusion (^0C)	∼1257
Température de Curie (^0C)	∼1150
Absorption (cm^{-1})	0.1
Diffusion (273^0K)	$4\ W/m/^0K$
Equation de Sellmeier	$n_o^2(\lambda) = 4.9048 + 0.1177/(\lambda^2 - 0.0475) - 0.0272\lambda^2$ $n_e^2(\lambda) = 4.5820 + 0.0992/(\lambda^2 - 0.0444) - 0.0219\lambda^2$
Anisotropie à $\lambda = 1550nm$	$n_o = 2.210, n_e = 2.138$
Coefficients electro-optiques (pm/V)	$r_{33} = 30.8, r_{31} = 8.6,$ $r_{22} = 3.4, r_{51} = 28$
Coefficients non-linéaires (pm/V)	$d_{22} = 3, d_{31} = 5,$ $d_{33} = 33$

Tab. 4.1 – Valeurs des différents coefficients du $LiNbO_3$ données par Crystaltech [12]

par évaporation sous vide. Typiquement, pour obtenir un guide monomode à 1550 nm, l'épaisseur est de l'ordre de 85nm pour un substrat en coupe X. Finalement, l'ensemble est plongé dans un bain d'acétone soumis aux ultrasons, ce qui permet d'éliminer la résine et le titane déposé au dessus. Ce procédé est appelé lift-off : A la fin de l'opération, seules les bandes de titane qui correspondent aux futurs guides restent. Le titane restant est diffusé au sein du cristal en plaçant le tout dans un four à haute température (1020^0C) pendant 10h heures. En fonction des différents paramètres du processus de diffusion (épaisseur de la couche de Ti, durée et température de diffusion), les profils d'indice de réfraction des guides peuvent être contrôlés. Le profil est gaussien en profondeur (voir figure 4.3(a)), et on peut ainsi fabriquer des guides monomodes pour le visible et le proche infrarouge et cela quelque soit la coupe de l'échantillon (X,Y,Z), mais plus dur sur la coupe Y.

Lorsque J.L. Jackel *et al* fabriquèrent et caractérisèrent pour la première fois des guides formés par échange protonique dans le $LiNbO_3$, leurs résultats suscitèrent un vif intérêt [77]. Le procédé de fabrication d'un guide d'onde par échange protonique (PE) est représenté dans la figure 4.4. Le cristal est plongé dans une source d'acide benzoïque riche en protons. Pendant cette immersion un échange entre les ions Li^+ de la surface du cristal et les ions

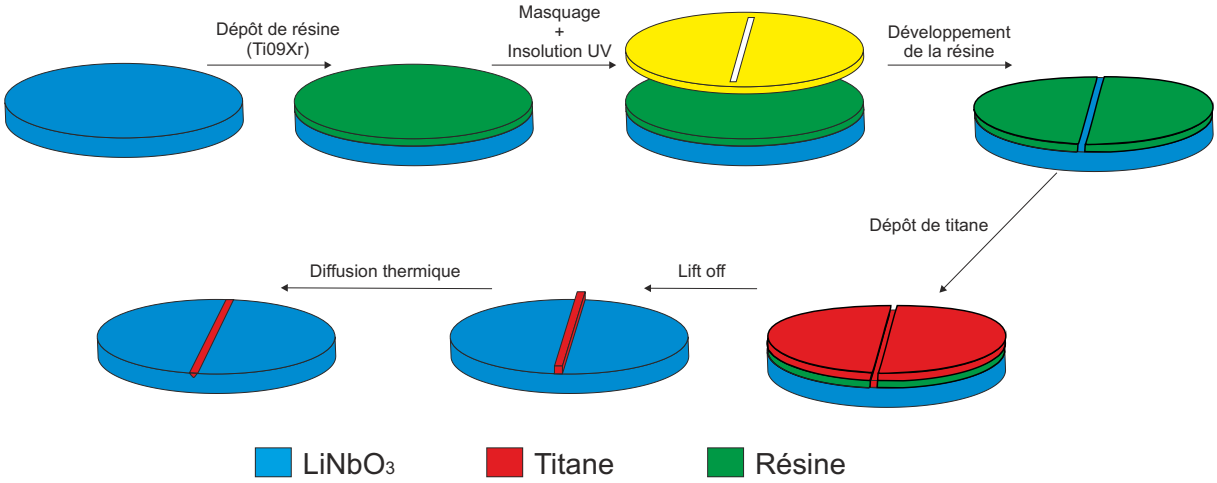


Fig. 4.2 – Principe de réalisation d'un guide Ti sur $LiNbO_3$.

H^+ de l'acide aura lieu selon la réaction suivante :

$$LiNbO_3 + xH^+ \rightarrow H_xLi_{1-x}NbO_3 + xLi^+ \tag{4.1}$$

Cette technique permet d'obtenir des guides à saut d'indice avec une forte variation de l'indice extraordinaire. Un guide APE : LiNbO3 (Annealed Proton Exchange $LiNbO_3$) est obtenu par recuit d'un guide PE à une température d'environ $300 - 400^0C$. Au cours du recuit les protons pénètrent en profondeur dans le matériau et le profil d'indice résultant correspond à un gradient d'indice (voir figure 4.3(b)).

La différence la plus importante entre les guides obtenus par diffusion titane et ceux obtenus par échange protonique existe en terme de polarisation de la lumière dans le guide. Pour les guides Ti :$LiNbO_3$, l'indice ordinaire et l'indice extraordinaire subissent tous les deux une augmentation : deux polarisations sont guidées. Par contre, la propagation de la lumière dans les guides APE n'est possible que pour les polarisations parallèles à l'axe extraordinaire car la modification d'indice induit par le processus de fabrication n'est pas isotrope et seul l'indice extraordinaire augmente.

Notre objectif est d'injecter la lumière dans les cavités photoniques à l'aide des guides

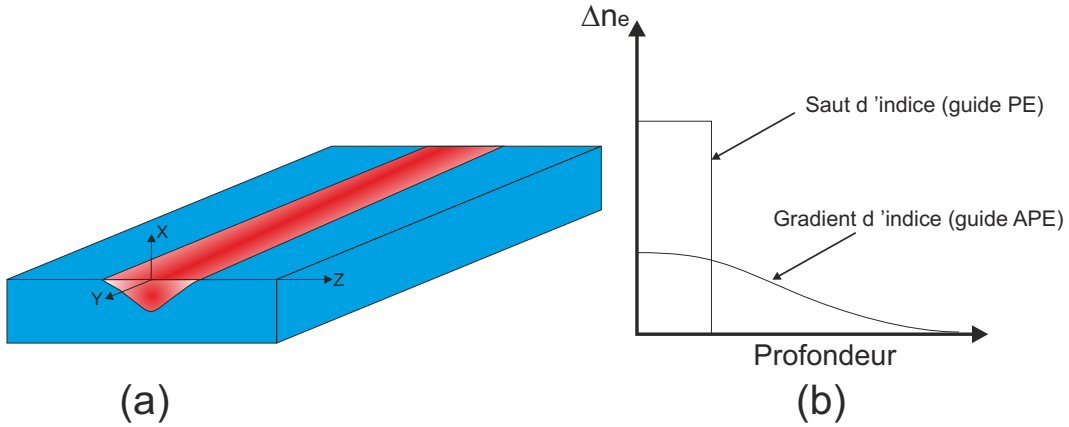


Fig. 4.3 – (a) Représentation schématique de la diffusion de titane dans le $LiNbO_3$. (b) Schéma du profil d'indice de réfraction extraordinaire d'un guide PE et d'un guide recuit : le recuit réduit la variation d'indice en surface et augmente la profondeur du guide.

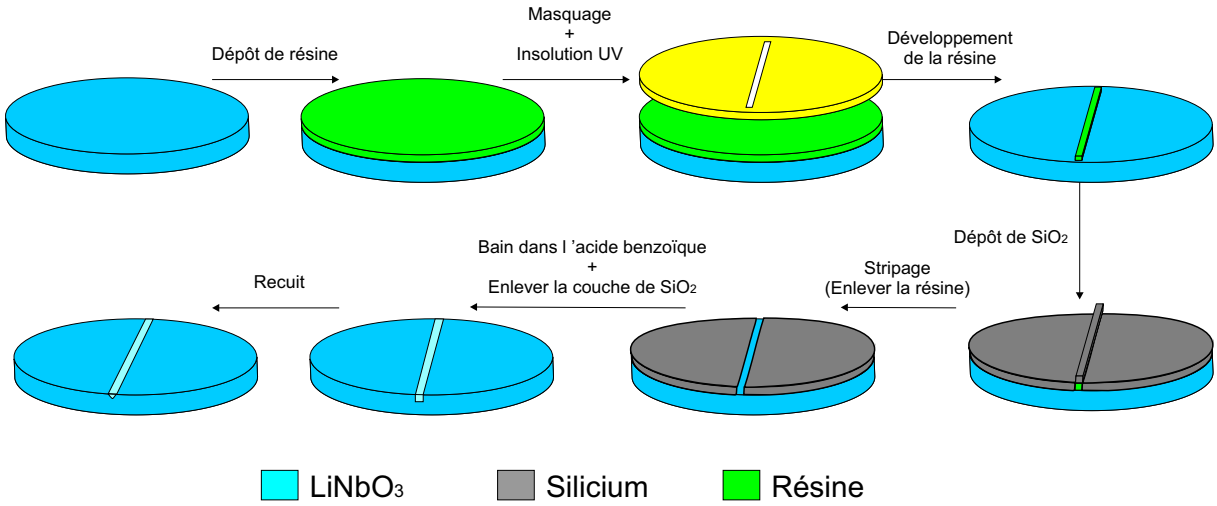


Fig. 4.4 – Principe de fabrication d'un guide par échange protonique PE et APE.

APE ou diffusés titane. Il faut que l'interaction entre le mode guidé et le cristal photonique soit maximale. Cette condition est un peu difficile à obtenir dans le cas des guides d'onde sur niobate de lithium, car le coeur du mode fondamental est enterré à plus de deux microns de la surface du substrat. Pour ce qui concerne notre étude, le wafer utilisé est en coupe X, et on choisit une propagation suivant l'axe cristallin Y pour la réalisation des guides d'onde. Nous étudions le comportement des cavités sur les guides obtenus par échange protonique suivi d'un recuit.

Pour les deux types de guides d'onde, la longueur du guide est fixé à 1.2 cm. La largeur du guide à la face d'entrée est fixée à 7 μm, puis une transition "adiabatique" élargit progressivement le guide, jusqu'à une valeur qui varie de 7 à 13 μm suivant les guides étudiés. Une vue schématique des guides est montrée dans la figure 4.5. Les paramètres géométriques et de fabrication des guides ont été choisis pour faire propager le mode fondamental à λ=1550 nm et remonter le mode à la surface du guide en comparaison avec des guides classiques qui ne font que 7 μm de large. Enfin, les faces des échantillons ont été polies pour avoir un bon couplage avec le faisceau incident et pour réduire les pertes optiques à l'entrée des guides.

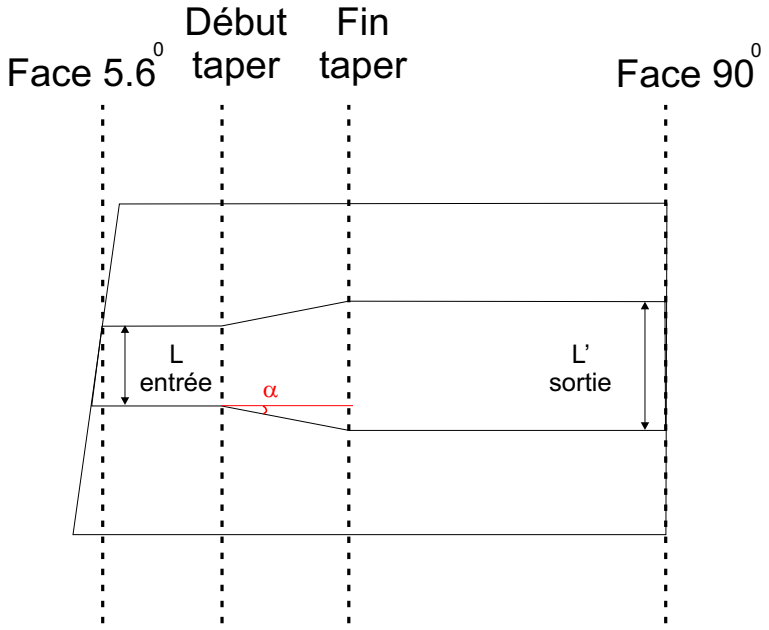


Fig. 4.5 – Schéma d'un guide optique sur un échantillon de niobate de lithium, L=7 μm,L'=7,11,12,13 μm et $\alpha = 0.1^0$.

Les guides sont fabriqués en collaboration avec Photline technologies[1] et par la centrale technologique MIMENTO de l'institut FEMTO-ST. Il existe 4 paires de guides sur chaque échantillon utilisé. Chaque paire est différente de l'autre au niveau de la largeur de la sortie du guide. Pour chaque paire, un guide est utilisé pour la réalisation des cristaux

[1]Entreprise issue de FEMTO-ST et qui est mondialement connue par les modulateurs électro-optiques et les communication en optique intégré sur niobate de lithium. Elle se situe à Besançon. http ://www.photline.com

photoniques et l'autre comme guide de référence pour la normalisation des spectres de transmission.

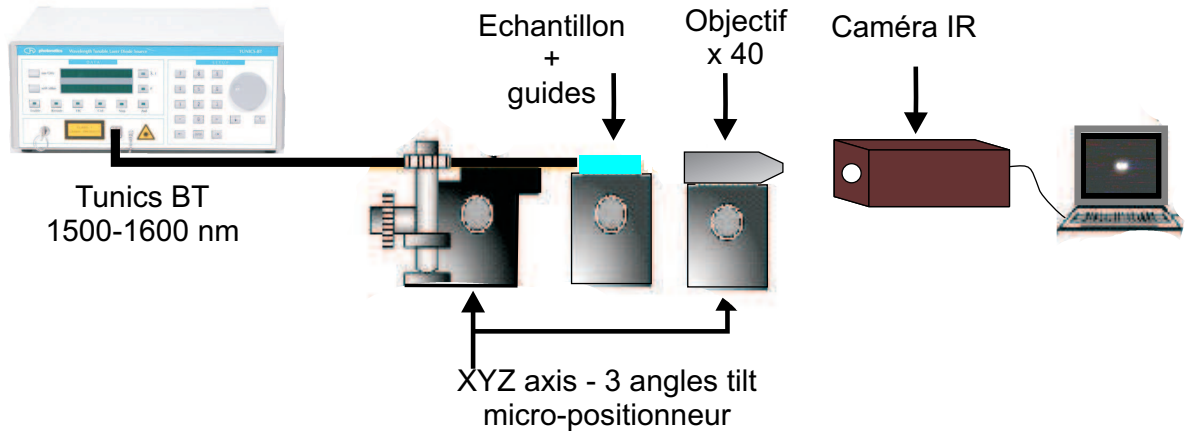
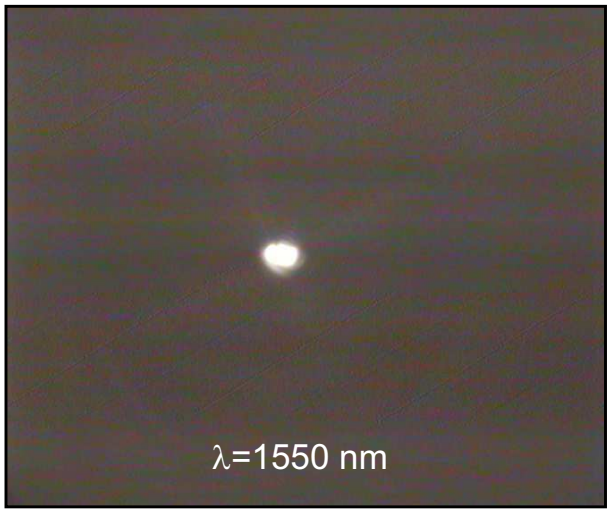


Fig. 4.6 – Schéma du montage expérimental utilisé pour les tests des guides d'ondes.

Le montage expérimental de la figure 4.6 est utilisé pour tester les guides. Un laser accordable en longueur d'onde est utilisé pour envoyer un faisceau incident monochromatique à λ=1550 nm. La lumière est couplée à l'entrée du guide par une fibre optique SMF28. Un objectif de microscope (×20) est utilisé à la sortie pour faire l'image de sortie du guide sur une caméra IR. La figure 4.7 représente une image d'un mode obtenue sur la caméra pour λ=1550 nm. Après avoir testé les guides, nous procédons à la fabrication des cristaux photoniques en salle blanche.

4.2 Fabrication des cristaux photoniques

Le niobate de lithium, comme la plupart des autres matériaux piézoélectriques, a la réputation d'être particulièrement difficile à usiner. Mais le développement rapide des cristaux photoniques et l'importance acquise par ce matériau dans le domaine de l'optique intégrée et la nanophotonique ont vite conduit à s'interroger sur les possibilités de le structurer afin d'améliorer l'efficacité des dispositifs existants et d'obtenir de nouvelles structures.



(a)

Fig. 4.7 – Image du mode guidé à travers les guides APE obtenue par une caméra IR et un objectif ×20 .

Différentes techniques d'usinage peuvent être employées afin de graver le niobate de lithium. Les méthodes de gravure développées au cours des 40 dernières années, peuvent principalement être classées en deux catégories. La première consiste en une gravure directe du niobate de lithium. La deuxième consiste en une gravure avec une altération préalable des propriétés physico-chimiques du matériau. Dans cette thèse nous intéressons plutôt à la première catégorie où on peut distinguer différents procédés :

- La gravure ionique réactive ou RIE (pour Reactive Ion Etching) qui consiste à exposer le substrat à un plasma provenant de l'ionisation d'espèces gazeuses fluorées (CF_4, CHF_3) judicieusement choisies pour réagir avec le matériau [82–84]. Pour être employée sur des cristaux photoniques, cette technique doit être précédée du dépôt préalable d'un masque définissant le cristal photonique. Ce masque est lui même obtenu par e-beam.
- L'usinage par faisceau d'ions focalisés ou FIB (pour Focused Ion Beam), la technique utilisée dans cette thèse pour la réalisation des cavités photoniques et qui sera décrite en détail dans la partie suivante

4.2.1 Gravure par faisceau d'ions focalisés

F. Lacour *et al.* [11] ont montré qu'il était possible d'obtenir des trous de 500 nm de diamètre et de 2 μm de profondeur par usinage FIB. La gravure par faisceau ionique ou Focused Ion Beam (FIB) est une méthode adéquate pour la réalisation des nano-structures.

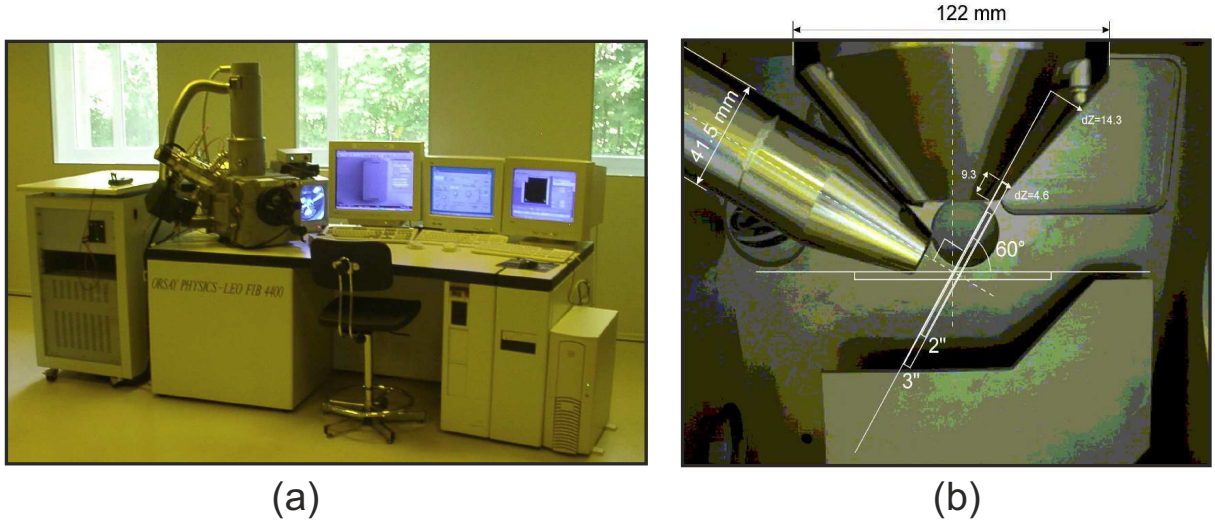


Fig. 4.8 – (a) Photo montrant le FIB d'Orsay physics installé à la centrale technologique MIMENTO de l'institut FEMTO-ST. (b) Photo de la chambre montrant le double faisceau MEB/FIB.

Le principe du FIB, représenté dans la figure 4.9(a) est très simple : une couche fine de Chrome (20 nm) est déposée sur le substrat, avant que celui-ci soit introduit dans le bâti du FIB. Le système FIB est un Orsay Physics LEO FIB4400, avec une source d'ions Ga^+ (LMIS : liquis meta ion source)(voir figure 4.8(a) et (b)). L'énergie d'accélération des ions est de 12 keV, et les ions sont focalisés sur l'échantillon à l'aide de lentilles électrostatiques avec un courant de 50 pA. Le faisceau est pseudo-gaussien et a une largeur de 40 nm au niveau de l'échantillon. Le balayage du faisceau sur l'échantillon est assisté par ordinateur (logiciel Elphy Quantum de Raith). Les motifs sont réalisés par plusieurs passages. En effet, une exposition multiple permet d'éviter le phénomène de redéposition dans les trous voisins qui est observé systématiquement si le motif est obtenu en une seule exposition. Les paramètres importants sont le " dwell time " (temps élémentaire), le " step size " (dimension du pas), et le nombre de boucles réalisées. Une autre contrainte se présente,

c'est que l'échantillon doit être connecté à la masse pour éviter l'accumulation de charges. Roussey *et al.* [24] ont, pour leur part, réduit la dimension des trous à 250 nm, pour une profondeur de l'ordre de 1.5 μm également. Les travaux poursuivis au sein de l'Institut FEMTO-ST, et dont nous verrons les fruits dans cette thèse, laissent encore augurer d'une nette amélioration de ces résultats.

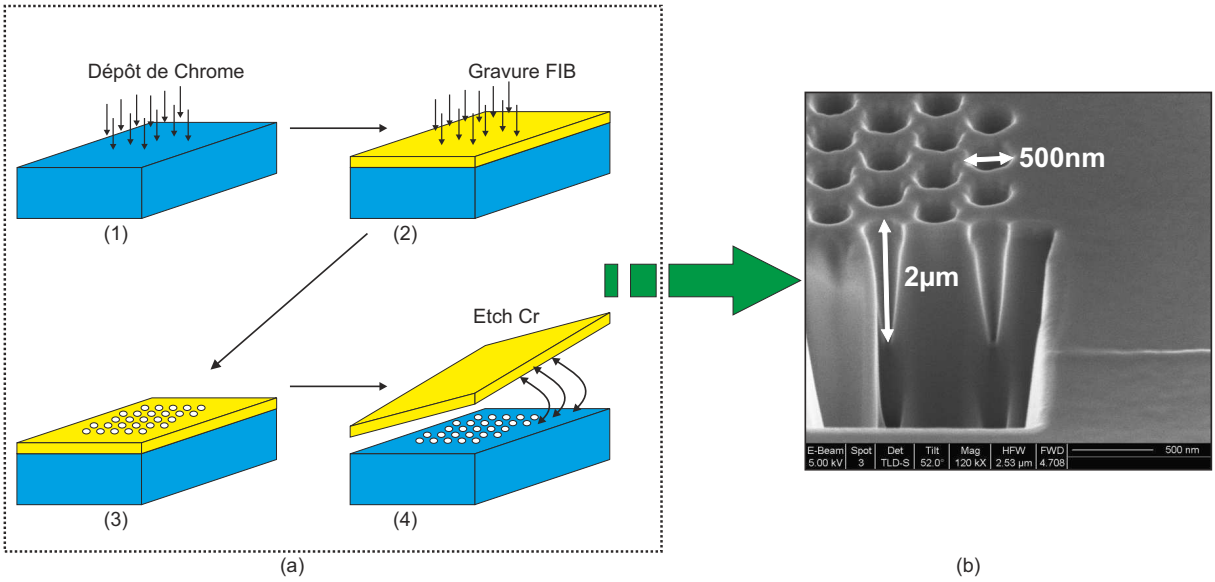


Fig. 4.9 – (a) Procédé de fabrication par faisceau d'ion focalisé, où l'échantillon est couvert d'une couche de chrome (1), suivi par la définition des motifs et une gravure par un faisceau d'ions de Ga^+ (2,3) pour arriver à la dernière étape où la couche de chrome est enlevée par une solution chimique spécifique (4). (b) Prototype d'un CP réalisé sur niobate de lithium obtenu par Lacour *et al.* [11].

Comme cela a déjà été mentionné auparavant, les cristaux photoniques sont réalisés sur des guides d'onde en niobate de lithium. Dans l'étude numérique, la valeur de l'indice était celle du guide obtenu par échange protonique avec n=2.143. Le dispositif final est représenté dans la figure 4.10, où la position des cavités se trouve au niveau de la troisième partie du guide (voir figure 4.5). L'utilisation d'un guide droit plus large en sortie de l'échantillon permet de s'affranchir du confinement latéral du champ électromagnétique lors de son interaction avec le cristal photonique et offre ainsi la possibilité de remonter le mode fondamental vers la surface du guide.

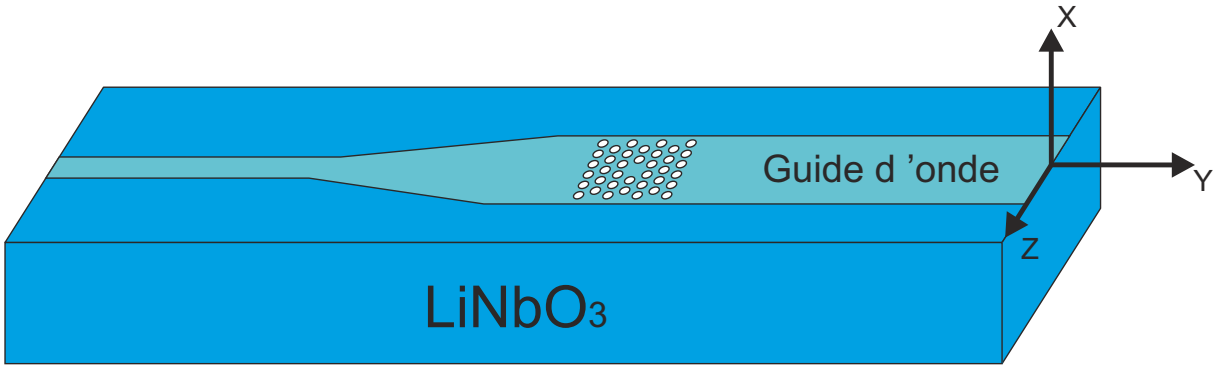


Fig. 4.10 – Configuration du composant où la cavité est réalisée sur un guide en niobate de lithium de coupe X et propagation Y.

4.3 Etude des microcavités SHD et H_1

Cette partie est consacrée à l'étude numérique à 1550 nm pour la réalisation des cavités photoniques. Les deux types de structures étudiées dans cette thèse consistent en des cavités photoniques ayant un seul mode de résonance. Ces cavités sont celles obtenues par la modification de la taille d'un trou du cristal photonique (ou SHD pour single hole defect) et les cavités de type H1. L'objectif de cette étude est de déterminer les différents paramètres permettant d'obtenir une cavité photonique où la résonance aura lieu à une longueur d'onde λ=1.55 μm. Dans la suite, nous parlerons de l'effet des différents paramètres géométriques de la maille sur le diagramme de bande, sur les spectres de transmission et de réflexion et sur la distribution du champ électromagnétique dans la cavité. Nous parlerons aussi de l'effet de la taille du cristal sur la résonance des cavités.

Le diagramme de bande et la carte de bandes interdites se présentent comme étant les meilleurs moyens pour déterminer les paramètres géométriques d'une cavité photonique. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, le diagramme de bande représente la fréquence normalisée $\omega_N = \frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda}$ en fonction du vecteur d'onde, où a est la période du cristal photonique. La carte de bandes interdites représente, quant à elle, la largeur de la bande interdite en fonction du rapport $\frac{r}{a}$ où r est le rayon des motifs.

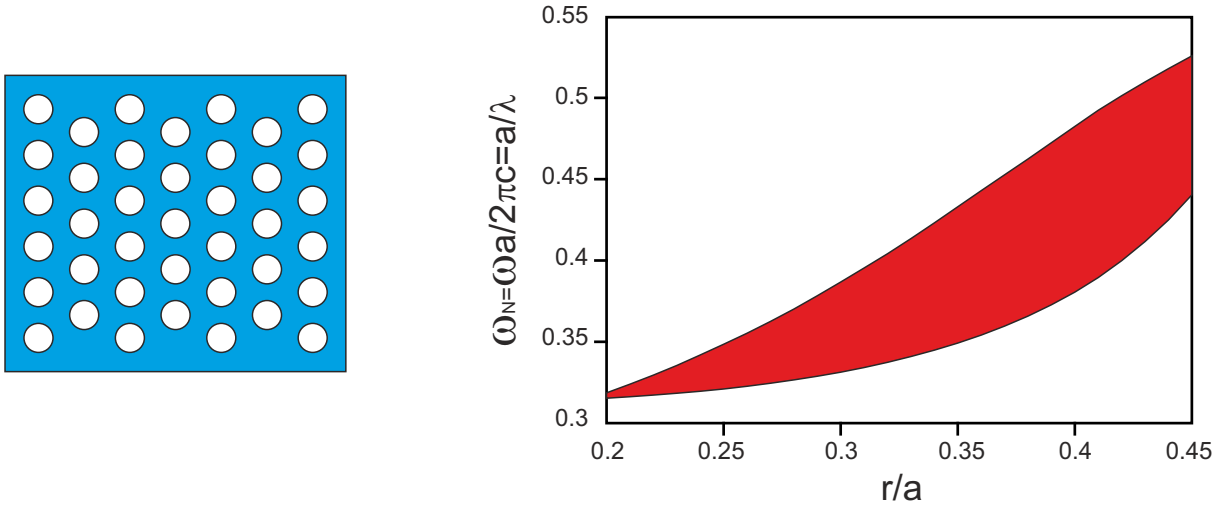


Fig. 4.11 – Carte de bande interdite pour une maille triangulaire, représentée à gauche, où le rapport $\frac{r}{a}$ varie de 0.2 à 0.45, dans le cas d'une polarisation TM.

Ainsi, pour les deux configurations choisies, deux calculs préliminaires sont réalisés. Le premier consiste à déterminer la largeur de la bande interdite photonique en fonction du rapport $\frac{r}{a}$ dans le cas d'une maille triangulaire. Le deuxième, consiste à observer la position du mode de cavité dans la bande interdite photonique en fonction du rapport $\frac{r_d}{a}$ pour chaque cavité. A partir de ces deux calculs nous pouvons déterminer la période a, le rayon r des trous d'air et le rayon du défaut r_d de façon que la résonance ait lieu à λ=1550 nm.

La figure 4.11 représente la carte de bande interdite d'une maille triangulaire de trous d'air cylindriques réalisés sur un guide d'onde APE en niobate de lithium. Cette carte de bande est réalisée dans le cas d'une polarisation TM où le champ magnétique $\overrightarrow{H}$ est parallèle à l'axe des trous. On peut observer que entre $\frac{r}{a} = 0.4$ et $\frac{r}{a} = 0.43$ nous avons une large bande interdite. Pour les cavités de types SHD et H1, le choix du rapport $\frac{r}{a}$ est fixé à 0.4, motivé par l'obtention d'une large bande interdite d'une part, et par le respect des contraintes technologiques, d'autre part. En effet, les bords des trous peuvent s'effondrer dans le cas de gros rayons. Nous allons maintenant séparer l'étude de chaque cavité. Dans chaque étude nous nous intéressons au défaut, à la fréquence de résonance, au spectres de transmission et de réflexion, et à la distribution du champ EM dans ces cavités à la

longueur d'onde de résonance.

4.3.1 Cavités SHD

Ayant fixé le rapport $\frac{r}{a}$ à 0.4, nous allons maintenant procéder à la détermination du rayon de défaut dans le cas de la cavité SHD. La figure 4.12 montre la variation de la position du mode de résonance dans la bande interdite photonique en fonction du rapport $\frac{r_d}{a}$. Tout d'abord on remarque que largeur de la bande interdite ne varie pas avec le rayons du défaut. En plus, on peut remarquer que la position du mode de résonance se décale vers les grandes valeurs de ω lorsque $\frac{r_d}{a}$ augmente, et tend vers le bord supérieur de la bande interdite lorsqu'on s'approche de la valeur du rayon des trous r. Le choix retenu, en respectant toujours les contraintes technologiques de la fabrication est pour $\frac{r_d}{a} = 0.16$ correspondant à un mode de cavité situé au milieu de la bande interdite. Visant une résonance à λ=1550 nm les paramètres géométriques sont simplement déduits à partir de la valeur de la fréquence normalisée du mode de résonance, et on obtient **a=690 nm, r=276 nm et r_d=110 nm** ($\frac{r_d}{a} = 0.16$).

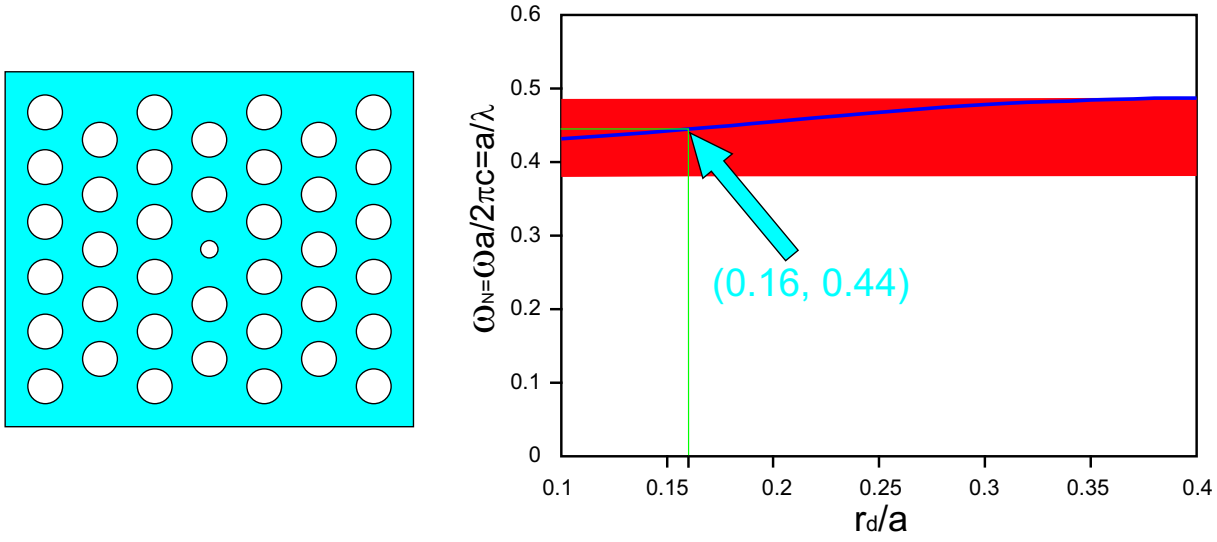


Fig. 4.12 – Influence du rayon de défaut r_d sur la position de la fréquence de résonance (ligne bleu) de la cavité à l'intérieur de la bande interdite représentée par la zone rouge de la structure à gauche.

La figure 4.13 montre la structure de bande de la cavité SHD étudiée pour les deux

polarisations TE (figure 4.13(a)) et TM (figure 4.13(b)). A noter que la structure de bande est obtenue par la méthode de supercell décrite dans le chapitre 2 et avec une dimension de 7×7. Le temps de calcul pour chaque polarisation dépend du nombre de bandes et de l'échantillonnage de $\overrightarrow{k}$ sur le contour de la zone de Brillouin. Pour ce calcul, où le nombre de bandes est de 60 et le vecteur d'onde $\overrightarrow{k}$ est divisé en 90 points, le temps de calcul est estimé à 35 minutes/polarisation sur une machine Core Quad de 4 Gbites de RAM.

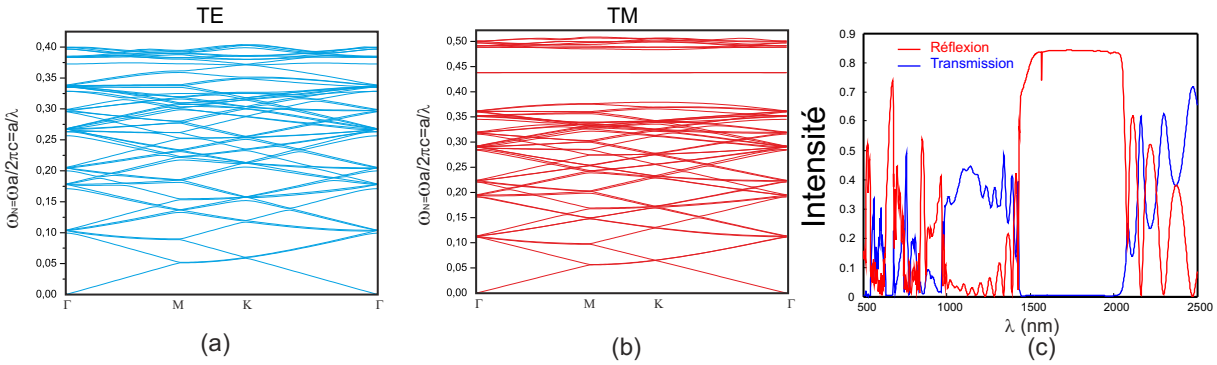


Fig. 4.13 – (a) Structure de bande en polarisation TE. (b) Structure de bande en polarisation TM. (c) Spectre de transmission (bleu) et de réflexion (rouge) d'une cavité de type SHD où a=690 nm, r=276nm et r_d=110nm.

Une étude en FDTD est ensuite réalisée pour déterminer les réponses spectrales de la cavité. La figure 4.13(c) montre les deux spectres de transmission (bleu) et de réflexion (rouge) obtenus par FDTD en polarisation TM et suivant la direction ΓM. De ces deux spectres on peut conclure que le mode de cavité est absent en mode de transmission. Ceci est dû à la largeur du guide optique qui est de 12 μm : le couplage entre le mode optique et le mode photonique est quasi-nul dans ce cas. Mais, ce mode existe en réflexion et à la longueur d'onde souhaitée. Une étude théorique dans le dernier chapitre nous montre l'effet de la largeur du guide optique sur le spectre de transmission du mode de cavité. Nous avons aussi comparé les spectres de transmission et de réflexion de cette cavité dans deux cas avec des paramètres différents pour regarder l'influence du rayon de défaut sur la réponse spectrale des cavités.

Les figures 4.14(a) et (b) montrent, respectivement, les spectres de transmission et de réflexion de trois cavités, où la courbe rouge correspond à la cavité décrite au-dessus

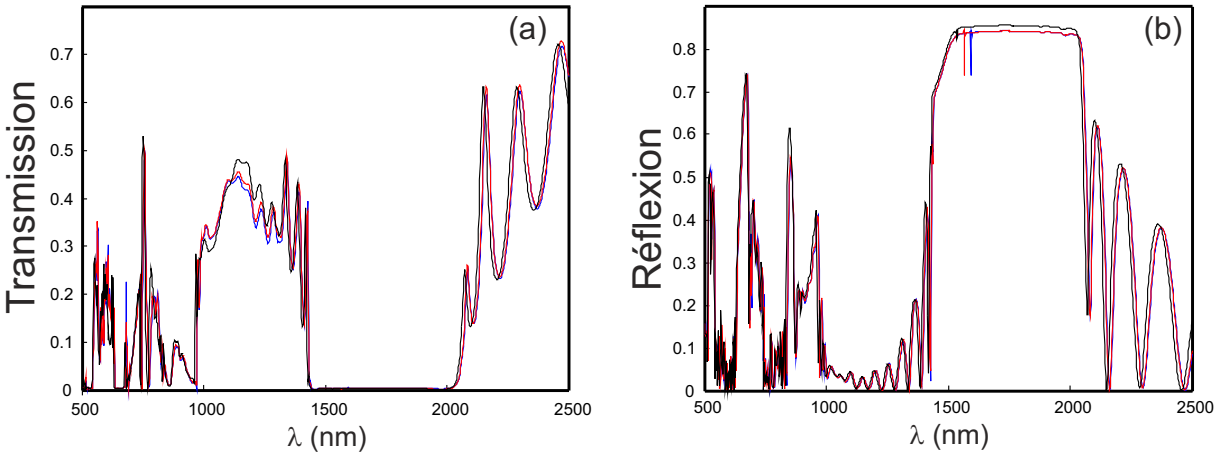


Fig. 4.14 – Spectres de transmission (a) et de réflexion (b) de trois cavités SHD où les courbes en bleu correspondent à $\frac{r_d}{a}$=0.13, les courbes en rouge $\frac{r_d}{a}$=0.16 et les courbes en noire à $\frac{r_d}{a}$=0.19.

($\frac{r_d}{a} = 0.16$), la courbe bleue à une cavité ayant un rapport $\frac{r_d}{a} = 0.13$ et la courbe noire à une cavité avec $\frac{r_d}{a} = 0.19$. Les deux figurent montrent une variation au niveau de la position de la résonance en réflexion et une petite variation au niveau des spectres de transmission estimée à $\Delta\lambda$=6 nm. A noter que le calcul des spectres est réalisé sur un gros calculateur de 8 processeurs et de 8Gbites de RAM. Le temps de calcul de chaque spectre est estimé à 6 heures. Ainsi, si on observe expérimentalement le même décalage en longueur d'onde pour ces cavités respectives, cela confirmera que des paramètres extérieurs ont une influence sur le spectre, et que les cavités peuvent donc être exploitées comme capteurs.

Cavité	**Période (nm)**	**Rayon (nm)**	**Rayon du défaut (nm)**
SHD_{013}	678	271	88
SHD_{016}	690	276	110
SHD_{019}	701	282	134

Tab. 4.2 – Valeurs des différents paramètres des cavités de type SHD réalisées avec le faisceau d'ions focalisé.

Ces études théoriques ont été suivies par la fabrication des cavités en salle blanche en utilisant la gravure directe par FIB. La figure 4.15 représente des images MEB pour les deux cavités SHD_{016} et SHD_{019} dont les caractéristiques géométriques sont données dans

le tableau 4.3.1. Les deux images 4.15(c) et (d) représentent une vue avec un angle de tilt de 45^0.

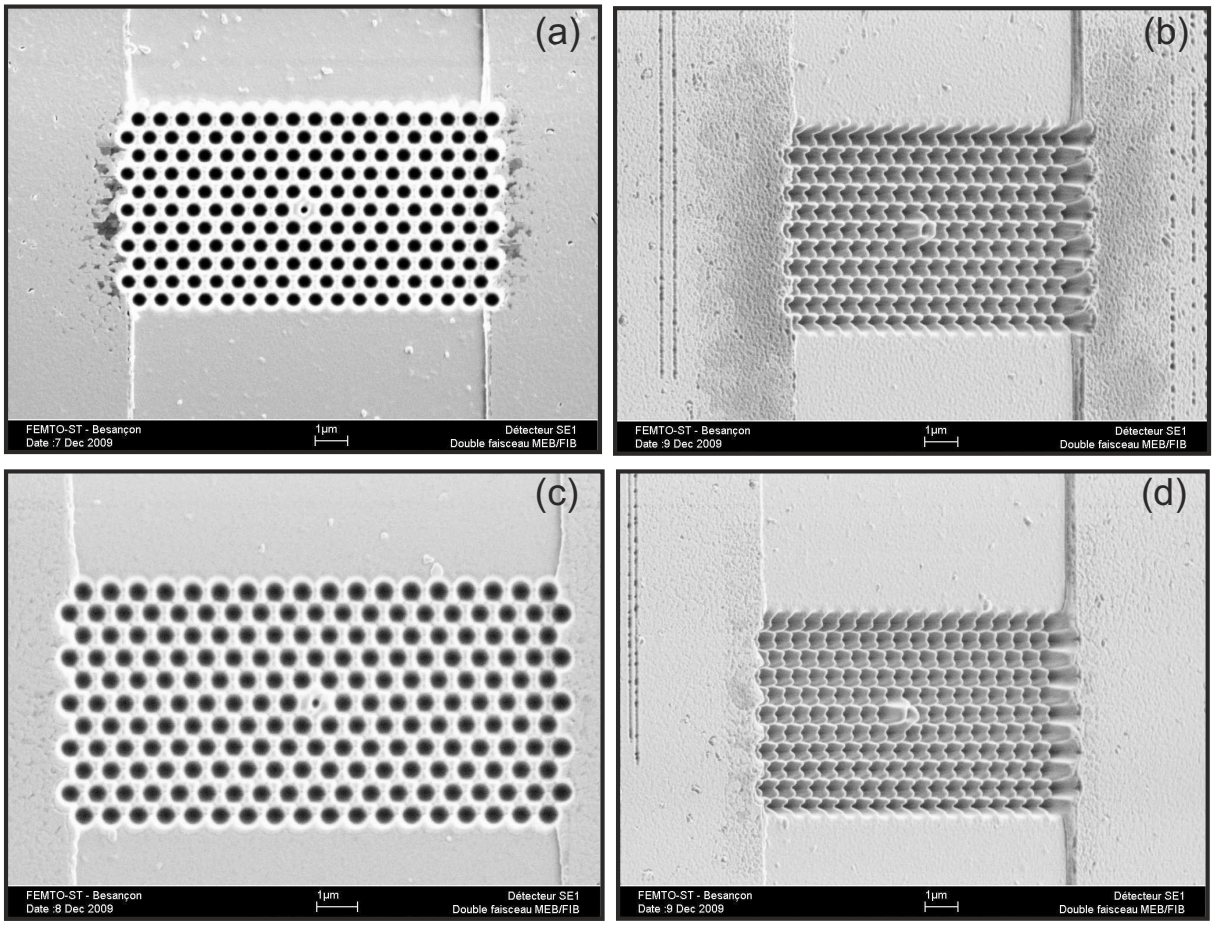


Fig. 4.15 – Images MEB des cavités réalisées par FIB, où (a) et (b) représentent la cavité SHD_{016} et (c) (d) la cavité SHD_{019}. Les images (b) et (d) sont prises avec un angle de 45^0

4.3.2 Cavités H1

Une étude similaire est réalisée pour des cavités H_1. Au début, nous avons étudié l'effet du rayon des motifs sur la position du mode de cavité dans la bande interdite. Pour cela, nous avons tracé la carte de bande interdite 4.16(a) où on voit que la fréquence normalisée du mode de cavité croît avec le rapport $\frac{r}{a}$. Pour les raisons évoquées dans le paragraphe précédent, nous avons retenu trois choix : $\frac{r}{a}$=0.33, $\frac{r}{a}$=0.35 et $\frac{r}{a}$=0.4. Les figures 4.16(a)

et (b) montrent la structure de bande pour la cavité ayant un rapport $\frac{r}{a}$=0.4, et pour les deux polarisations TE et TM respectivement.

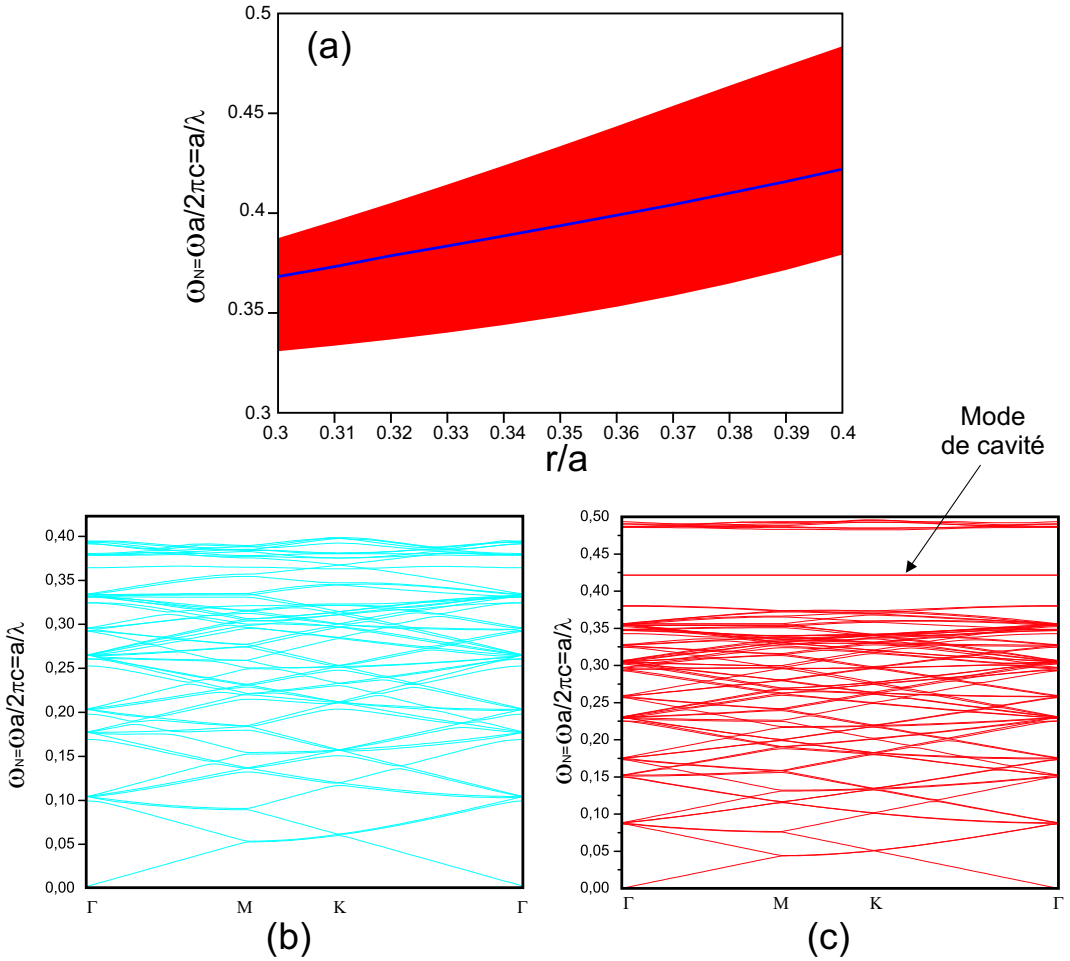


Fig. 4.16 – (a) Variation de la fréquence normalisée du mode de résonance en fonction du rayon des trous d'air. Structure de bande de la cavité H1 ($\frac{r}{a}$=0.4) pour la polarisation TE(bleu) et TM(rouge).

Ainsi, pour les trois configurations, nous allons présenter les spectres de transmission et de réflexion en détail. La polarisation est TM et la direction de propagation est ΓM. Les paramètres des trois cavités sont choisis de façon à ce que le mode de résonance ait lieu à λ=1550 nm, ils sont donnés dans le tableau 4.3.2. De plus, la structure ne doit pas

être grande pour, d'une part faciliter la fabrication, et d'autre part, pour avoir un bon coefficient de transmission du mode de résonance de la cavité.

Cavité	**Période (nm)**	**Rayon (nm)**
$H1_{04}$	653	261
$H1_{033}$	196	594
$H1_{035}$	610	213

Tab. 4.3 – Valeurs des différents paramètres des cavités de types SHD réalisées avec le faisceau d'ions focalisé

Les figures 4.17(a) et(b) montrent, respectivement, les spectres de transmission et de réflexion des trois cavités. La courbe rouge correspond au spectre de transmission de la cavité $H1_{033}$, la courbe bleue correspond à la cavité $H1_{035}$ et la courbe noire correspond à la cavité $H1_{04}$. Nous remarquons que dans les trois cas la position du pic de résonance est toujours à λ=1550 nm, mais les bords des bandes interdites changent en fonction du rapport $\frac{r}{a}$, ce qui est tout à fait normal. A noter que le calcul FDTD réalisé pour les trois cavités est fait dans le cas d'une polarisation TM et suivant la direction ΓM et pour 300000 pas temporels correspondant à un temps réel de : 300000$\times\Delta$t$\simeq$11 ps. De plus, les calculs sont faits pour une largeur de guide de 12 μm pour décrire un état proche de la réalisation. On peut remarquer aussi que l'anti-pic de résonance est plus fort en intensité que le pic en transmission. Les oscillations que l'on peut observer dans les deux spectres sont dues à un effet Fabry-Pérot entre les deux faces d'entrée et de sortie du cristal photonique. Une dernière conclusion qu'on peut tirer de ces spectres est que pour une même cavité à une longueur d'onde fixe la relation T+R=1 n'est pas vérifiée. Ainsi la relation s'écrit T+R+P=1 où P correspond aux pertes liées à la diffraction de la lumière par le cristal photonique et qui se propagent dans d'autre directions.

Les calculs précédents nous ont permis de déterminer les paramètres des différentes structures et leurs spectres associés. Or, le nombre de rangées de motifs de part et d'autre du défaut suivant la direction de propagation de la lumière est très important. Nous allons, par des calculs FDTD, déterminer l'influence de ce nombre de rangées sur l'intensité du pic de résonance. A cette fin, nous avons pris le cas de la structure $H1_{04}$ avec une largeur de guide

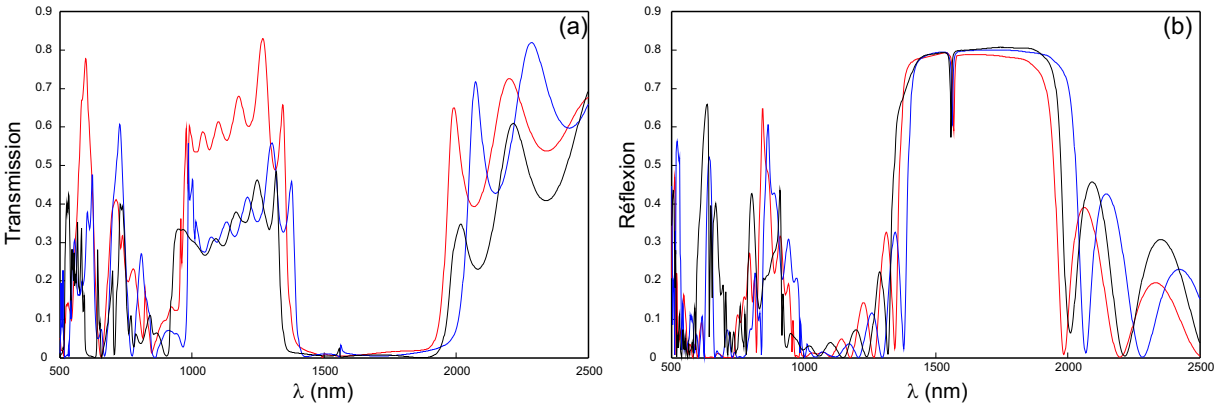


Fig. 4.17 – Spectres de (a) transmission et (b) réflexion, obtenus par FDTD, de différentes cavités de type H1, où la courbe rouge représente la cavité $H1_{033}$, la courbe bleu pour la cavité $H1_{035}$ et la courbe noir pour la cavité $H1_{04}$

de 7 μm. La figure 4.18(a) montre les spectres de transmission de trois ayant un nombre de rangées différent de trous de part et d'autre du défaut. La figure 4.18 représente un zoom-in au niveau de la résonance, où on peut remarquer que l'intensité de ce mode diminue en augmentant le nombre latéral de rangées. La courbe bleue représente le spectre d'une cavité constituée de 4×4 rangées, la courbe rouge correspond à une cavité comprenant 5×5 rangées et la courbe noire à une cavité formée de 6×6 rangées. De ce fait, la transmission du mode de cavité varie en fonction du nombre de rangées et croît en diminuant ce nombre pour atteindre un maximum pour une structure constituée de 9 rangées (4×4) et si ce nombre diminue la transmission du mode de cavité décroît à nouveau. De ce fait, dans toutes les études théoriques et expérimentales nous avons fixé comme nombre de ragées latérale de 4×4.

Pour vérifier la faisabilité des cavités, les études théoriques ont été suivies par la fabrication des cavités en salle blanche en utilisant le FIB. Les figures 4.19(a), (c) et (e) représentent des images MEB pour les trois cavités $H1_{033}$ et $H1_{04}$ et $H1_{035}$ respectivement. Les trois images 4.19(b),(d) et (e) représentent une vue avec un angle de 45^0.

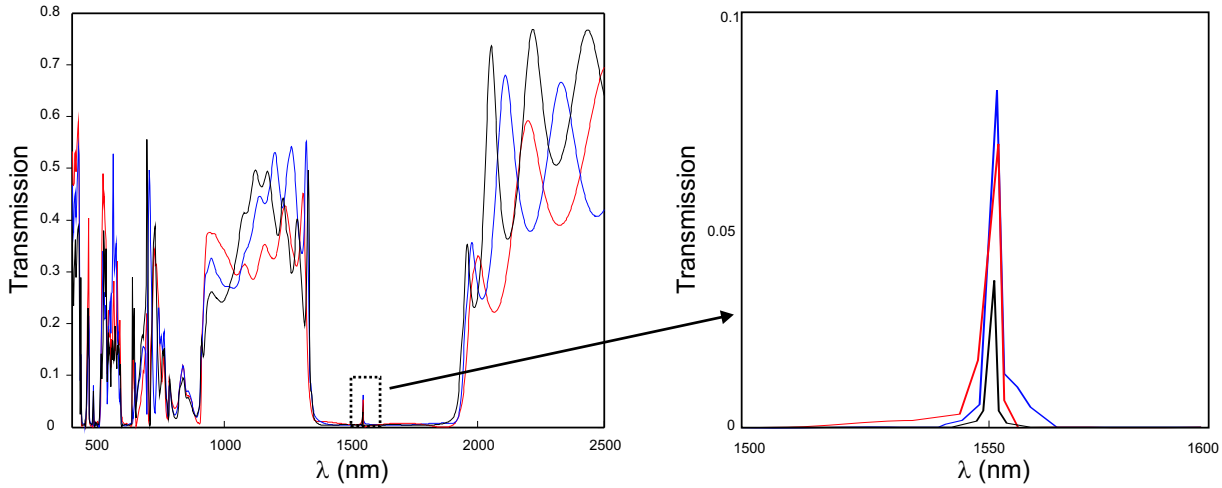


Fig. 4.18 – Variation de l'intensité du pic de résonance (avec un ajustement entre 1500 nm et 1600 nm), obtenue par FDTD, en fonction de la taille de la cavité $H1_{04}$.

4.4 Etude expérimentale des cavités

Nous avons maintenant tous les paramètres en main pour passer à l'étude de faisabilité des cavités à 1550 nm. Dans un premier temps, nous allons décrire toutes les expériences menées au cours de cette thèse pour valider la faisabilité des cavités réalisées sur des guides d'ondes en niobate de lithium.

4.4.1 Etude en transmission des cavités

Le dispositif utilisé pour caractériser le comportement des cavités photoniques est représenté dans la figure 4.20. Il permet une mesure de larges spectres en transmission. Une source supercontinuum commerciale de type Leukos-SM (voir Annexe) est couplée à l'entrée du guide via une fibre SMF28 fixée à son extrémité dans une ferrule en verre poli d'un angle de 5^0 et déposée sur un micropositionneur XYZ. La source supercontinuum présente un spectre s'étalant de 400 à 2000 nm avec une puissance moyenne de 80mW. Une autre fibre est couplée à la sortie du guide pour collecter la lumière transmise. L'alignement est effectué en commençant par relier la fibre de sortie à un puissance mètre. On positionne ainsi les deux fibres d'entrée et de sortie de façon à obtenir le maximum de puissance en

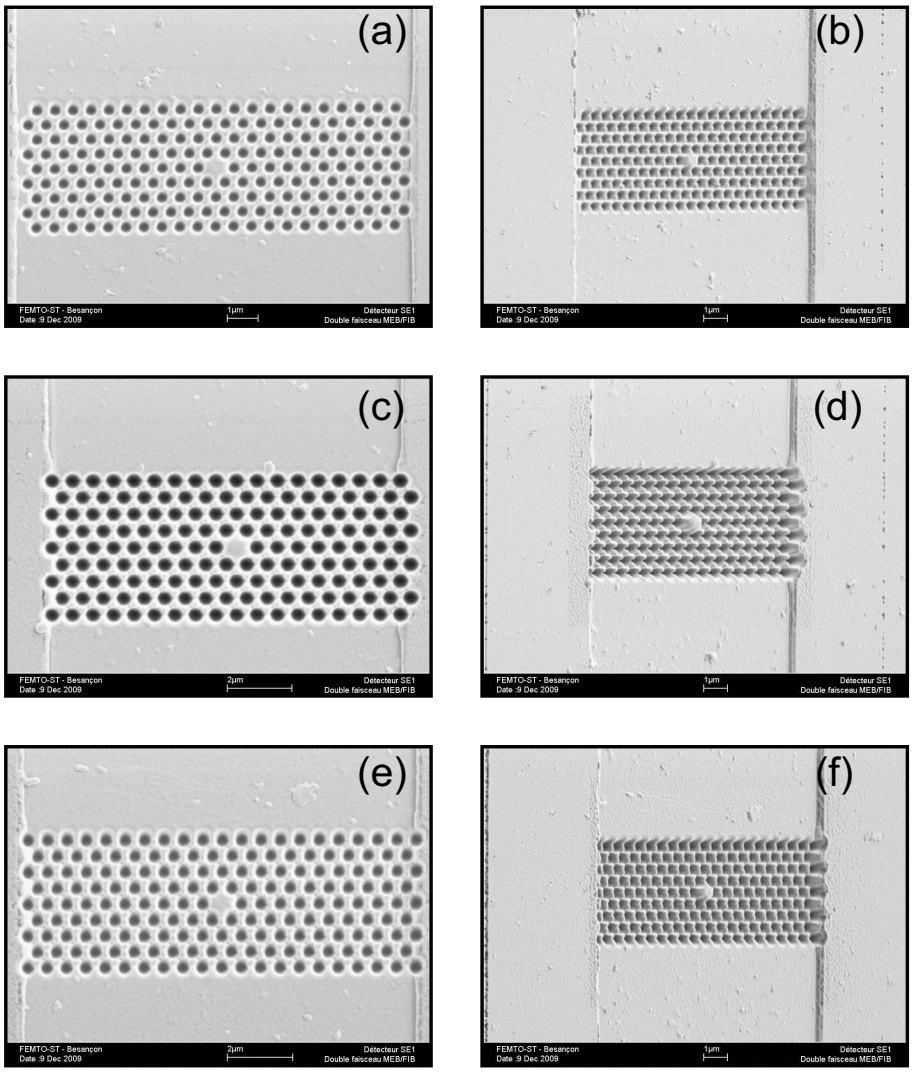


Fig. 4.19 – Images MEB des différentes cavités réalisées par FIB.

sortie. Dans un deuxième temps, la fibre de sortie est connectée à un analyseur de spectre permettant de relever des spectres large bande allant de 500 à 1700 nm.

Une première étude est réalisée pour les cavités de types SHD représentées dans la figure 4.15. Les tests expérimentaux ont été faits pour une largeur spectrale de 1000 nm à 1750 nm correspondant à la zone qui nous intéresse. L'échantillon testé est composé de 8 guides (par paire de 2). Le premier spectre déterminé est celui d'un guide sans cavité photonique jouant le rôle d'un guide référence pour la normalisation. La courbe rouge de la figure

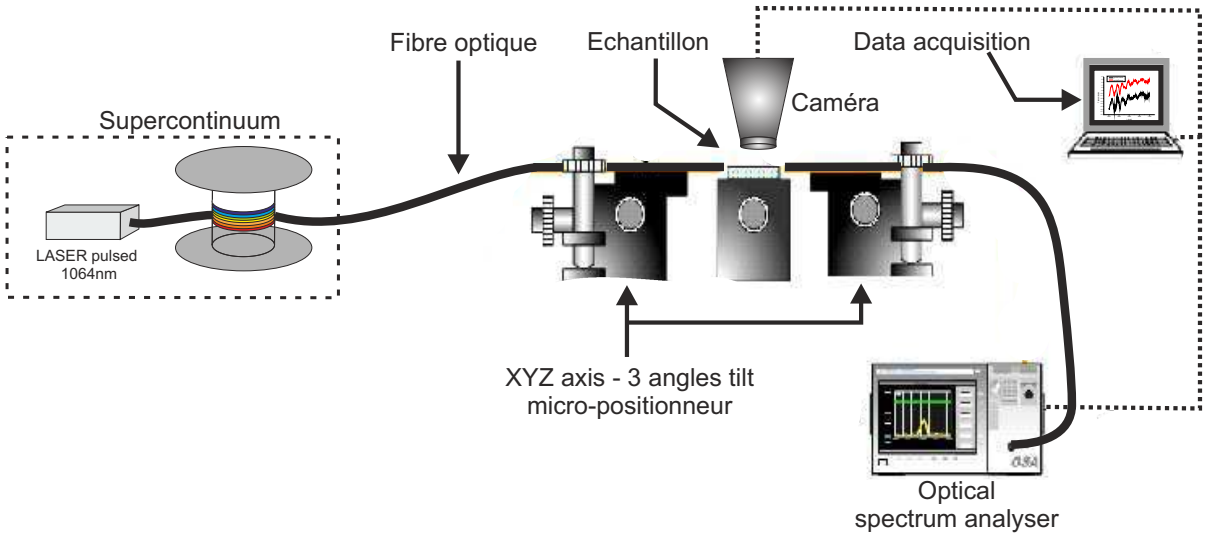


FIG. 4.20 – Montage expérimental dédié aux mesures de transmission en large spectre.

4.21(a) représente le spectre de transmission d'un guide normal sans cavité photonique. Le pic à λ=1064 nm représente celui de la source. On remarque que le spectre du guide est plat et ne représente pas des fluctuations. La courbe noire (figure 4.21(a)) représente le spectre d'un guide avec une cavité photonique, qui est voisin du guide de référence. L'effet de la cavité est clairement observable au niveau de l'intensité transmise et au niveau des oscillations présentent dans le spectre. Pour obtenir les spectres de transmission pour les deux cavités de la figure 4.15, une normalisation des spectres des guides avec des cavités par rapport au spectre du guide de référence est réalisée. Les figures 4.21(b)et (c) représentent le spectre de transmission de la cavité SHD_{016}. La figure 4.22(a) montre les deux spectres normalisés des deux cavités étudiées.

A partir des spectres expérimentaux nous remarquons l'apparition d'une bande interdite photonique entre λ=1200 nm et λ=1700 nm avec un taux d'extinction de 15 dB en son centre. Nous remarquons aussi que les deux spectres ont la même allure mais qu'ils sont décalés en longueur d'onde. La figure 4.22(b) montre un agrandissement au niveau des oscillations. Nous déduisons qu'un décalage de $\Delta\lambda$=4 nm est présent entre les spectres à λ=1320 nm. Les oscillations qui se présentent dans les spectres expérimentaux ont été

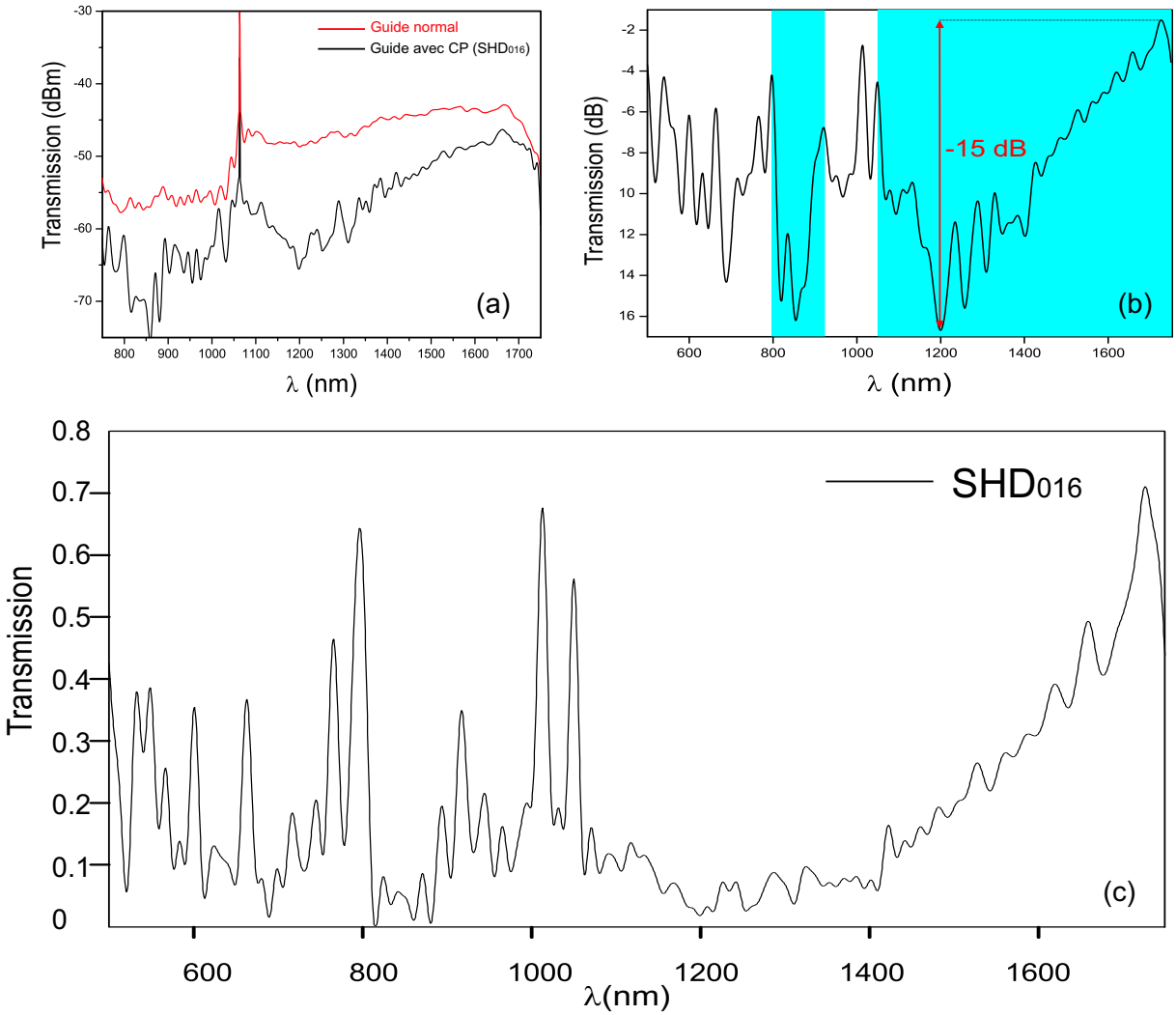


Fig. 4.21 – Spectres expérimentaux de la cavité SHD_{016}.

traitées comme étant dues à un effet Fabry-Pérot. On a donc déterminé l'interval spectral libre (ISL : la distance qui sépare deux maxima et qui vaut ISL=$\frac{\lambda^2}{2nL}$) et on a calculé la distance L équivalente à cet ISL. La longueur de cavité qui correspond aux oscillations observées est de l'ordre de 5 μm, ce qui correspond à la longueur du cristal photonique dans la direction de propagation de la lumière.

Comme les calculs numériques l'avaient prédit en figure 4.13(d), nous avons obtenu une bande interdite photonique sans l'apparition du mode de cavité. Par contre, la position de

la bande interdite expérimentale n'est pas exactement au même endroit que celle prédite numériquement. Cela peut être dû aux défauts de fabrication et à la conicité des trous d'air. Par ailleurs, les résultats expérimentaux confirment le décalage des spectres qui est prédit théoriquement à $\Delta\lambda$=6 nm. Finalement, l'allure des deux spectres de la figure 4.22(a) nous permet de déduire que le banc de mesure utilisé ainsi que les mesures sont stables.

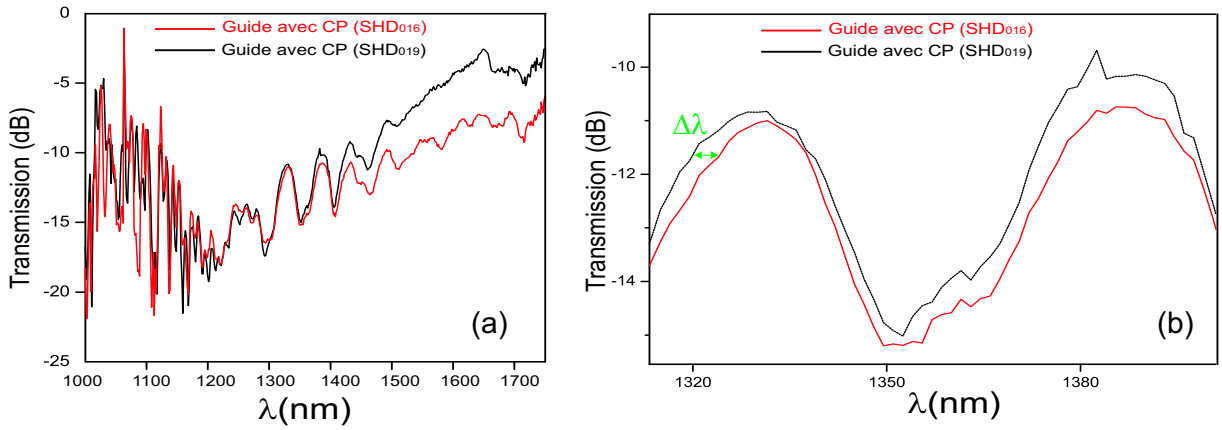


FIG. 4.22 – (a) Comparaison entre le spectre de la cavité SHD_{016} et celui de la cavité SHD_{019}. (b) Agrandissement des spectres de l'image (a) à λ=1320 nm où $\Delta\lambda$ correspond au décalage entre les deux spectres.

Des études expérimentales similaires ont été réalisées sur les cavités H_1. La figure 4.23(a) montre les spectres de transmission déterminés à partir du banc de mesure de la figure 4.20. La courbe rouge de cette figure représente le spectre de transmission d'un guide sans la cavité photonique, par contre la courbe noire représente le spectre du guide avec la cavité $H1_{0.35}$. L'effet de la présence de la cavité photonique sur le guide optique APE est clairement visible sur les spectres, où on peut remarquer la présence de zones à faible transmission avec des taux d'extinction qui atteignent jusqu'à 20 dB (dans la zone 800 à 900 nm). En plus, on remarque dans la zone de l'IR moyen des fluctuations et des pertes qui sont dues à la présence de la cavité. Pour déterminer le spectre de la structure nous avons normalisé le spectre du guide avec cavité au guide seul et nous avons obtenu le spectre de transmission normalisé de la figure 4.23(b). On peut remarquer la présence de deux bandes interdites photoniques : une entre 780 nm et 880 nm et une autre entre 1000 et 1700 nm.

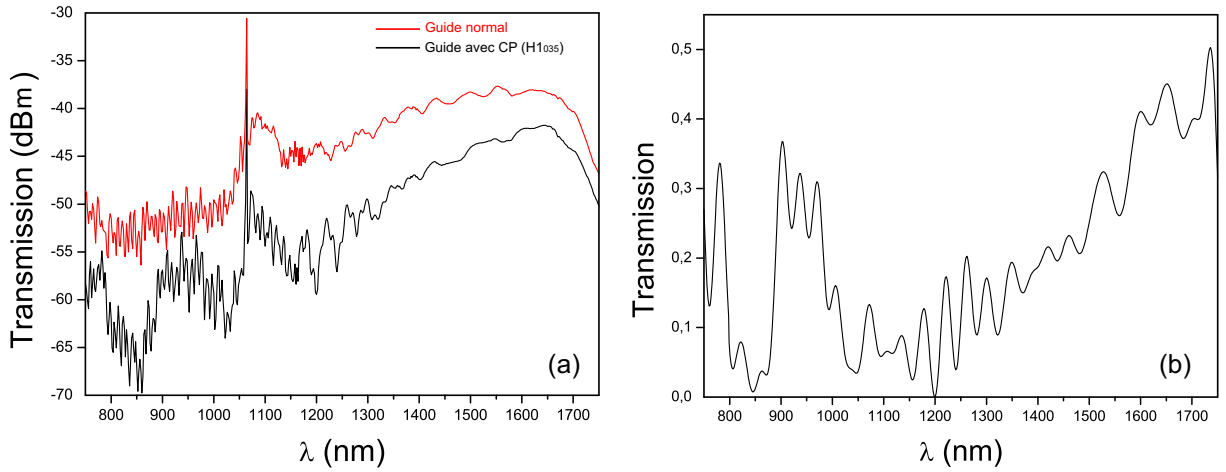


Fig. 4.23 – Spectres expérimentaux obtenus pour la cavité $H1_{035}$. (a) Spectres de transmission pour un guide normal (en rouge) et d'un guide avec la cavité (noir). (b) Spectre de transmission normalisé par rapport au guide de référence.

Des tests expérimentaux ont également été réalisés pour la cavité $H1_{0.4}$. Le spectre de transmission normalisé obtenu pour cette cavité est schématisé dans la figure 4.24. On peut remarquer la présence de deux bandes interdites photonique, une entre 720 nm et 850 nm et une deuxième entre 1200 nm et 1750 nm. Les résultats obtenus coincident avec le spectre théorique représenté en bleu.

Dans cette partie nous avons étudié expérimentalement les spectres de transmission des cavités H1 et SHD. Nous avons mis en évidence que la présence des bandes interdites photoniques. Mais la question que nous posons cette fois ci est : comment se comporte le cristal photonique en réflexion ? Afin de répondre à cette question, nous avons procédé à des tests en réflexion et en transmission avec le même banc expérimental. La partie suivante traite l'étude en réflexion des cavités photoniques.

4.4.2 Etude en réflexion + transmission des cavités

Pour l'étude en réflexion, nous avons choisi la cavité de type $H1_{04}$. Le banc de mesure mis en place est représenté dans la figure 4.25. Un circulateur optique est utilisé pour

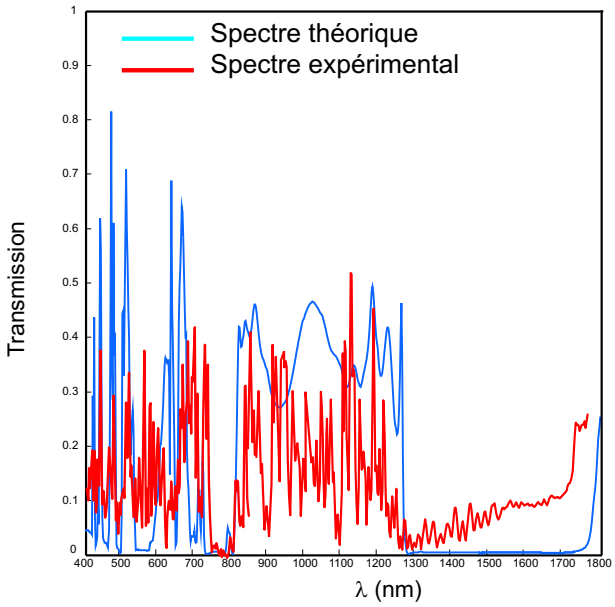


Fig. 4.24 – Spectre expérimental, en rouge, obtenu pour la cavité $H1_{0.4}$ qui montre la présence de deux bandes interdites photoniques. La courbe bleue représente le spectre théorique de la cavité $H1_{0.4}$.

collecter la lumière réfléchie par la voie 2. La voie 1 est connectée à une source laser accordable en longueur d'onde. La lumière est couplée au guide par une fibre optique SMF28. La lumière transmise est aussi collectée par une fibre optique SMF28. Le système (fibre d'entrée, échantillon, fibre de sortie) est posé sur des platines de translation micrométriques afin d'effectuer un alignement optimal. La fibre de sortie et la voie 2 du circulateur sont reliées à un puissance-mètre permettant de mesurer la puissance transmise et réfléchie respectivement. Le système (puissance mètre, laser) est automatisé par un interface GPIB, permettant de recueillir les spectres sur un ordinateur placé à côté du banc expérimental.

Plusieurs spectres ont été réalisés pour différentes résolutions de mesure. La figure 4.26 montre les résultats obtenus avec une résolution de mesure de 0.01nm. La figure 4.26(a) corresponde aux résultats obtenus pour le guide avec la cavité photonique. Par contre le spectre de la figure 4.26(b) est obtenu pour un guide normal sans structure photonique. De la figure (a) on remarque des oscillations périodiques en transmission et en réflexion. Ces oscillations sont traitées comme un phénomène Fabry-Pérot. Dans la figure (a), l'ISL_λ=0.1765nm de la courbe noire indique la présence d'une cavité de longueur

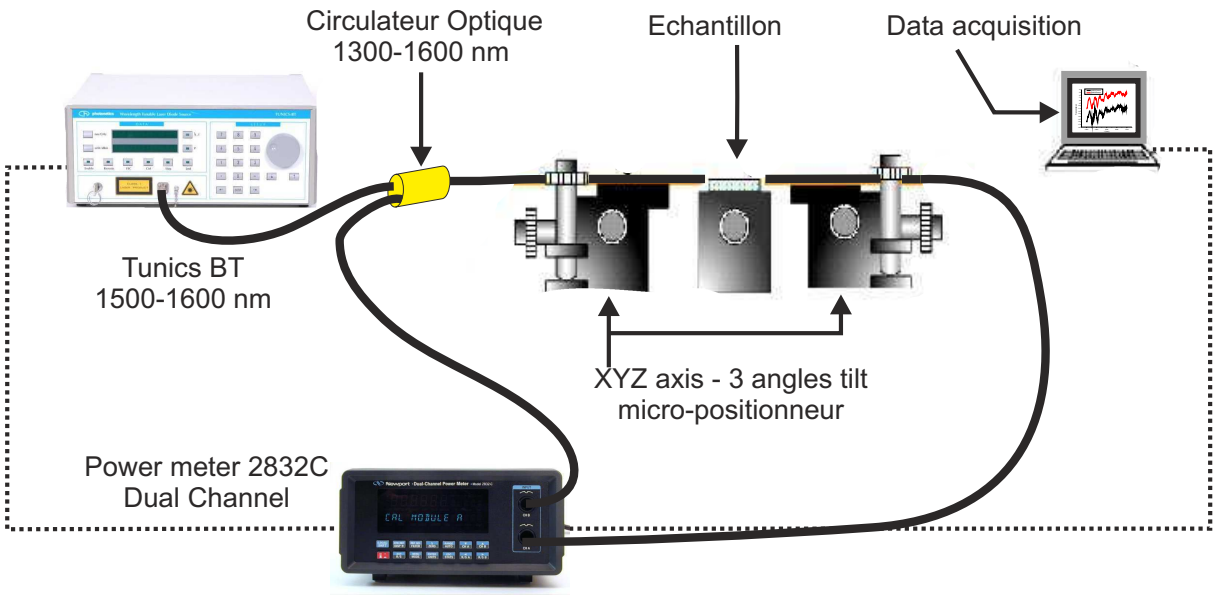


Fig. 4.25 – Schéma du montage expérimental utilisé pour les mesures en réflexion et en transmission.

L_1=3.17 mm qui correspond à la distance entre la cavité photonique et la face de sortie du guide. Pour la courbe rouge l'ISL_λ=0.0588 nm implique une cavité de distance L_2=9.52 mm qui correspond à la distance séparant l'entrée du guide et la cavité photonique. Les différentes réflexion sont schématisées sur la figure 4.27 où les réflexions "entrée guide-cavité" et "sortie guide-cavité" sont représentées respectivement en rose et en jaune.

Pour démontrer que les résultats sont bien liés à la cavité photonique nous avons réalisé un test pour un guide normal voisin. La figure 4.26(b) montre la réponse en transmission et en réflexion d'un guide simple : on peut observer que les oscillations périodiques disparaissent. On peut remarquer que la transmission est plus forte que la réflexion même si on est dans la zone de la bande interdite. Cela s'explique par le fait que le couplage entre le mode guidé et le cristal photonique n'est pas assez fort. Comme la profondeur du guide est de 7 μm et celle des trous est de 2 μm, l'intensité de la lumière transmise couplée avec la cavité est plus petite que celle de la lumière transmise en-dessous des trous d'air (dans le guide).

Nous avons ainsi réalisé des tests en réflexion qui nous on permis de voir pour la première

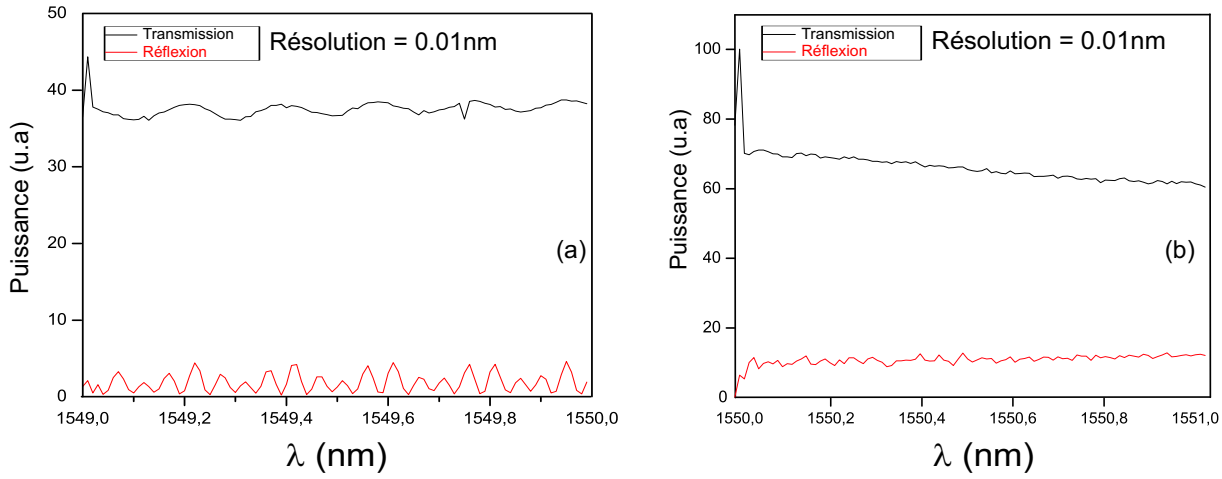


FIG. 4.26 – Résultats expérimentaux obtenus avec une résolution de mesure de 0.01nm où (a) représente le spectre de transmission (en noir) et de réflexion (en rouge) pour un guide avec la cavité photonique et (b) représente les spectres obtenus pour un guide normal.

fois l'effet sur la réflexion d'une cavité réalisée sur un guide d'onde en niobate de lithium. Une fois encore le mode de cavité n'est pas apparu dans les spectres de réflexion obtenus, ce qui est en accord avec les prévisions numériques et les mesures en transmission. Pour confirmer néanmoins la résonance de la cavité, et évaluer la distribution de champ dans la cavité pour la longueur d'onde de résonance et pour d'autre valeurs aussi, nous avons procédé à des tests en champ proche optique.

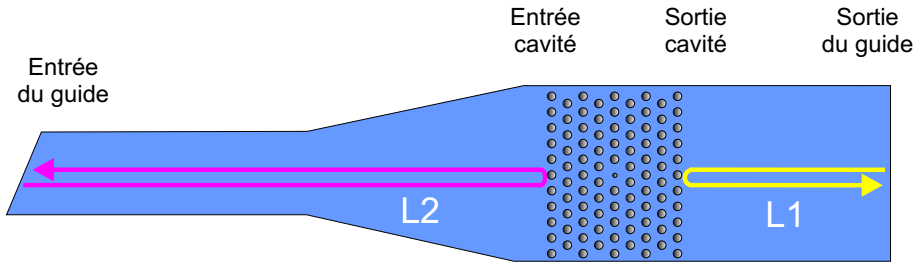


FIG. 4.27 – Représentation des différents réflexions qui se produisent dans le guide.

4.5 Caractérisation optique en champ proche

Si l'on analyse la lumière diffusée par un objet limité dans l'espace et éclairé par un rayonnement monochromatique de longueur d'onde λ (Fig. 4.28), on s'aperçoit qu'elle

comprend deux familles d'ondes. Des ondes dites radiatives ou propagatives qui peuvent se propager loin de l'objet (jusqu'à l'infini en l'absence d'absorption) et des ondes dites non-radiatives ou évanescentes dont l'amplitude décroît exponentiellement à mesure que l'on s'éloigne de l'objet.

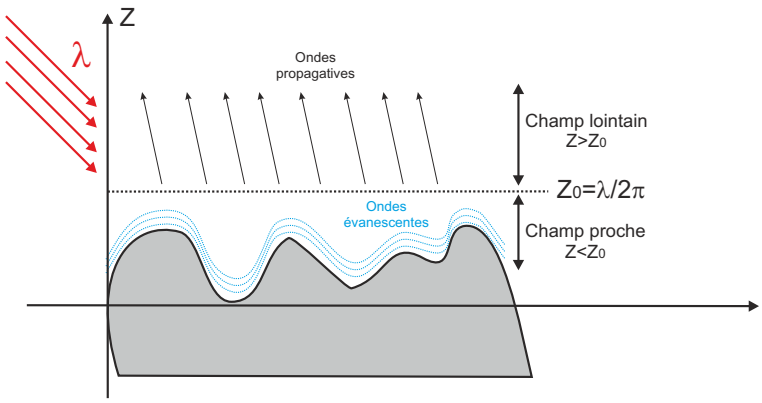


Fig. 4.28 – Schéma illustrant la diffraction de lumière en ondes propagatives et évanescentes par un objet éclairé en réflexion.

On peut définir le champ proche de cet objet comme la zone de l'espace où l'amplitude des ondes évanescentes n'est pas négligeable devant celle des ondes radiatives. Il s'agit donc d'une zone située au voisinage de l'objet, à une distance très inférieure à la longueur d'onde d'illumination. Mais qu'ont donc de si intéressant ces fameuses ondes évanescentes ? On peut montrer que l'information sur les hautes fréquences spatiales est contenue dans les ondes évanescentes et toute observation d'un objet en champ lointain est forcément limitée en résolution. Ce résultat est bien connu en optique sous le nom de limite de diffraction.

En effet, le critère de Rayleigh-Abbe pour la microscopie optique classique stipule qu'un microscope ayant une pupille circulaire, un angle d'ouverture θ et baignant dans un milieu d'indice n possède une limite de résolution latérale donnée par :

$$d = \frac{0.61\lambda}{n\sin(\theta)} \tag{4.2}$$

Pour avoir une résolution élevée, on peut choisir la possibilité de récupérer l'information sur les hautes fréquences spatiales qui est contenue dans les ondes évanescentes, idée an-

cienne proposée par Synge en 1928 [85] mais tardivement mise en place dans les années 80 [86] pour des raisons technologiques. Dans ce cas, on peut s'affranchir de la limite de diffraction, et on entre de plein pied dans le monde de la microscopie en champ proche.

La microscopie optique en champ proche propose de capter le champ évanescent grâce à une nano-sonde et ainsi d'avoir le maximum d'informations sur l'objet étudié. Pour cela, on utilise une pointe effilée, soit diélectrique, soit métallisée. La difficulté de la mesure se situe dans la position de cette pointe aussi proche que possible de la surface de la structure mais aussi de son contrôle à cette petite distance. Les expérimentateurs séparent les microscopes en champ proche en deux grandes familles : les microscopes à sonde avec ouverture et les microscopes à sonde sans ouverture. Nous désignerons par la suite l'ensemble de ces microscopes sous l'acronyme SNOM (pour Scanning Near-Field Optical Microscope). En ce qui nous concerne on s'intéresse au SNOM avec des sondes sans ouverture.

Le choix de la sonde n'est pas un point de détail pour l'expérimentateur. C'est même la première question qui se pose avant de commencer une expérience. La technique utilisée dans nos expériences pour obtenir une pointe à partir d'une fibre optique dénudée est celle par étirage à chaud à l'aide d'une étireuse de chez Sutter Instrument. Un faisceau laser intense issu d'un laser CO_2 chauffe localement une fibre optique tandis que celle-ci est lentement étirée par deux bras mécaniques. Cette méthode permet de fabriquer simultanément deux pointes "jumelles" en un temps relativement court d'une dizaine de secondes. Il est à noter que de nombreux paramètres entrent en jeu et vont influencer la qualité de la pointe obtenue : vitesse d'étirage, intensité du laser et le choix de la fibre optique. La pointe utilisée dans nos expériences est une fibre optique multimode et non métalisée. La figure 4.29 représente une image obtenue par un microscope d'une pointe diélectrique utilisée dans notre étude expérimentale.

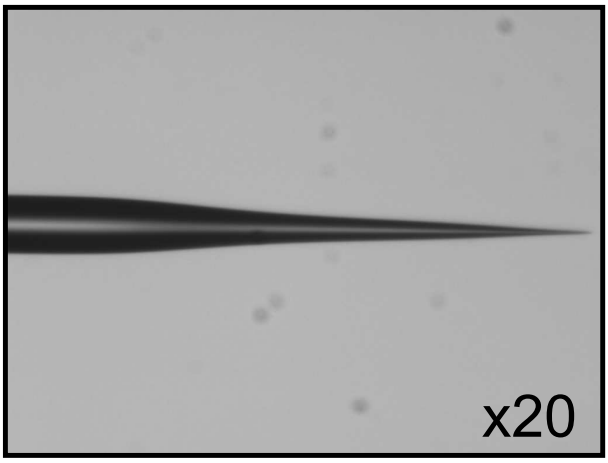


Fig. 4.29 – Image obtenue par un microscope optique (×20) d'une pointe diélectrique fabriquée par étirage à chaud.

4.5.1 Présentation de la configuration expérimentale

Un schéma simplifié du microscope est présenté en figure 4.30. Le système utilisé est une tête SNOM commercial, NT-MDT SMENA, où la sonde est fixée à un petit tube piézoélectrique appelé tube excitateur. Lorsque la sonde est loin de la surface, il y a absence d'interaction : le système est à l'équilibre. L'oscillation du tube piézoélectrique permet l'excitation d'un des modes propres de vibration de la fibre. Lorsqu'on approche la sonde de la surface, la variation d'amplitude de vibration de la sonde due aux forces de cisaillement entraîne un déséquilibre. L'analyse du signal se fait à l'aide de l'électronique permettant de maintenir constante l'amplitude de vibration de la sonde et donc la distance entre la sonde et l'échantillon. Le processus décrit est connu par : "asservissement de la pointe". Le système présenté nous permet d'obtenir deux images simultanément : une image topographique (shear force) et une image optique à l'aide du détecteur infra-rouge. L'échantillon est éclairé par un laser tunable (1500 - 1600 nm) couplé au guide optique par une fibre optique monomode. L'échantillon et la fibre d'entrée sont placés sur des micro-positionneurs XYZ. Le microscope à champ proche optique ayant été présenté, nous nous intéressons dans le prochain paragraphe à décrire les résultats obtenus.

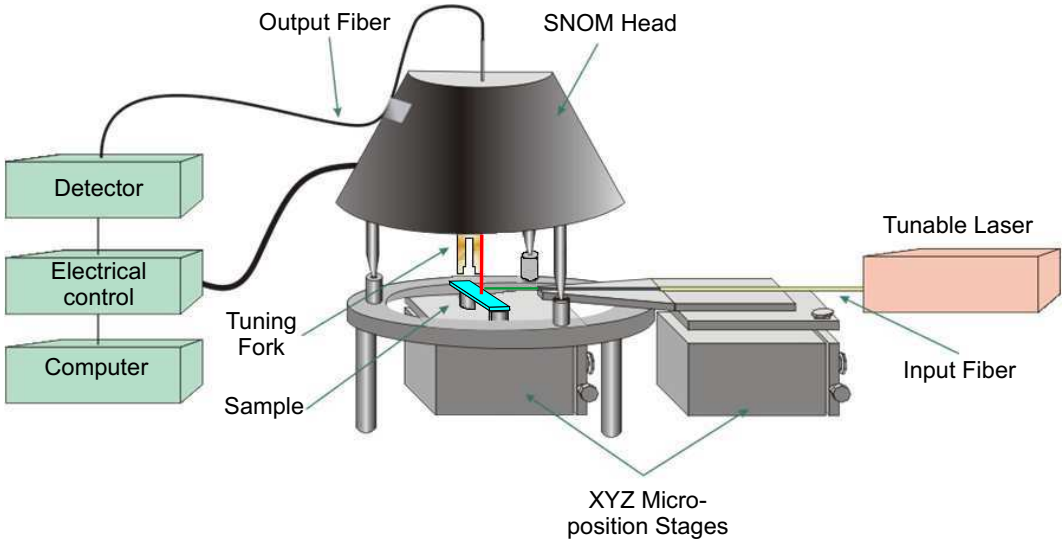


FIG. 4.30 – Schéma du montage expérimental utilisé pour les caractérisations en champ proche.

4.5.2 Résultats expérimentaux

Les premières structures à cristal photonique étudiées expérimentalement en champ proche optique au sein du laboratoire ont été des cristaux photoniques à maille carré inscrites sur un substrat de niobate de lithium [87]. Ensuite des guides photoniques de types W1 ont été étudiés par M.P. Bernal et al. [25]. Ici, nous présentons des résultats obtenus sur des microcavités à maille triangulaire de type H1 sur niobate de lithium. Les cavités de ce type ont déjà été étudiées en microscopie de champ proche optique et en champ lointain sur d'autres types de substrat [88, 89]. Cependant, personne jusqu'à présent n'a présenté une étude en champ proche sur les modes de cavités en niobate de lithium. Donc nous présentons l'ensemble des résultats obtenus sur les cavités ayant été étudiées dans le cadre de cette thèse.

La première microcavité étudiée est une cavité de type H1, c'est-à-dire qu'au sein d'un cristal photonique bi-dimensionnel à maille triangulaire un trou a été omis. Les paramètres du cristal photonique ont été prévus pour présenter une bande interdite photonique large autour de 1550 nm avec un mode de cavité unique situé vers λ=1550 nm. Le rayon des

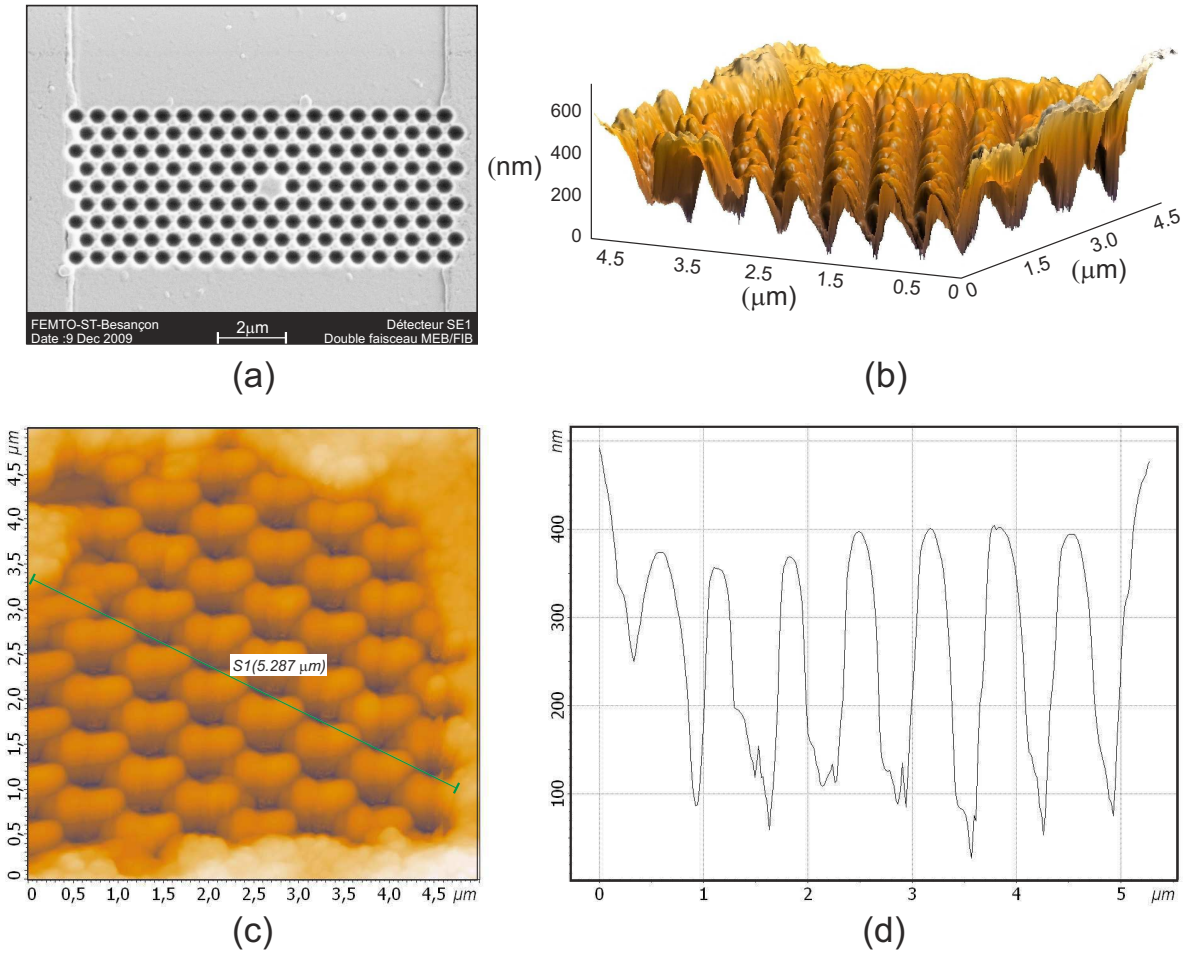


Fig. 4.31 – Image MEB en (a) et image AFM tridimensionnelle en (b) de la cavité étudiée. (c) Image AFM 2D de la cavité avec une coupe montrant la périodicité des trous d'air représentée en (d).

trous d'air est de r=263 nm et ils sont espacés d'une période a=653 nm. La figure 4.31(a) représente une image obtenue par un microscope électronique après la réalisation de la cavité par FIB. Une étude des échantillons peut également se faire à l'aide d'un microscope à force atomique ou Atomic Force Microscope (AFM) comme le montre les figures 4.31(b) et (c). Les mesures AFM ont permis de valider les dimensions de la structure étudiée, où la ligne verte correspond à : $\frac{7 \times Periode}{\sqrt{3}/2}$. Ainsi la mesure AFM nous donne une période de 654 nm qui coïncide avec la valeur de base programmée au FIB.

Au début, l'échantillon est illuminé par un laser de puissance 10 mW. Le laser utilisé est

un laser accordable en longueur d'onde pouvant être accordé de 1500 à 1600 nm. Plusieurs tests ont été réalisés pour différentes longueurs d'ondes. Les images optiques, présentées dans la figure 4.32 montre les résultats obtenus pour λ=1520 nm (a), λ=1540 nm (b) et pour λ=1560 nm (c).

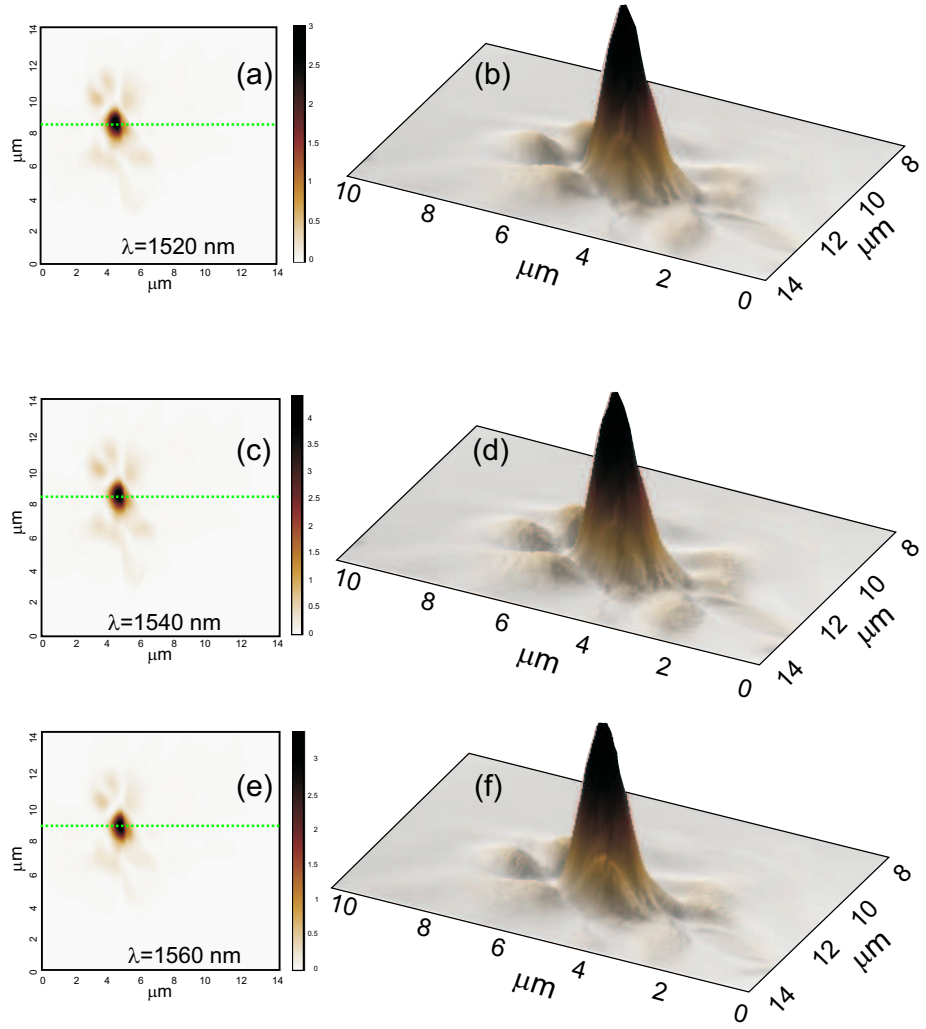


Fig. 4.32 – Images optiques en champ proche 2D ((a), (c), (e)) et 3D ((b), (d), (f)) pour différentes longueurs d'onde.

Par ailleurs, la figure 4.32(b) représente une vue tridimensionnelle de la distribution du champ EM dans la cavité pour les différentes longueurs d'ondes. D'après ces images on peut distinguer le maximum d'intensité situé au niveau du défaut et des petits lobes voisins qui correspondent aux trous qui entourent le défaut. En plus, on observe la distribution du

champ dans les trois cas mais la différence est au niveau de l'intensité attribuée à chaque image optique.

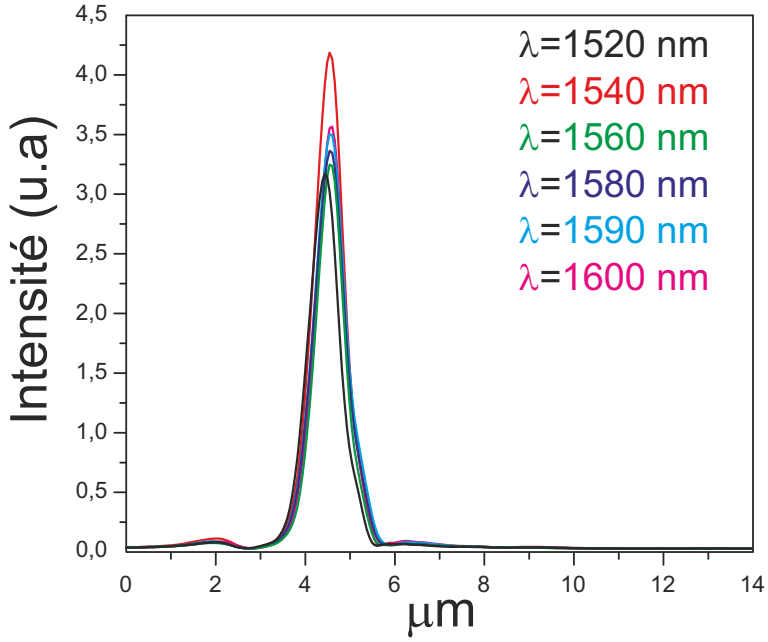


Fig. 4.33 – Coupe horizontale (voir figure 4.32 en vert) au niveau du défaut et pour différentes longueurs d'onde.

La figure 4.33 représente une coupe montrant le maximum d'intensité pour différentes longueur d'ondes. On peut déduire que le maximum d'intensité est pour λ=1540 nm, cela correspond à la résonance de la cavité. Des calculs théoriques, toujours par FDTD, ont été réalisés pour valider les résultats expérimentaux. La cartographie numérique du champ électrique et magnétique est représentée dans la figure 4.34 où la résonance a lieu à λ=1550 nm.

L'image MEB de la structure photonique caractérisée en champ proche est montrée dans la figure 4.35(a). La figure 4.35(b) représente l'image optique de la distribution du champ électrique pour la longueur d'onde de résonance λ=1540 nm et qui coincide avec les prédictions théoriques représentées dans la figure 4.34(a). La tache la plus brillante est localisée au centre de la cavité avec un maximum d'intensité et peut être assimiler au mode de cavité de la figure 4.34(a). Six autres taches moins brillants se présentent autour

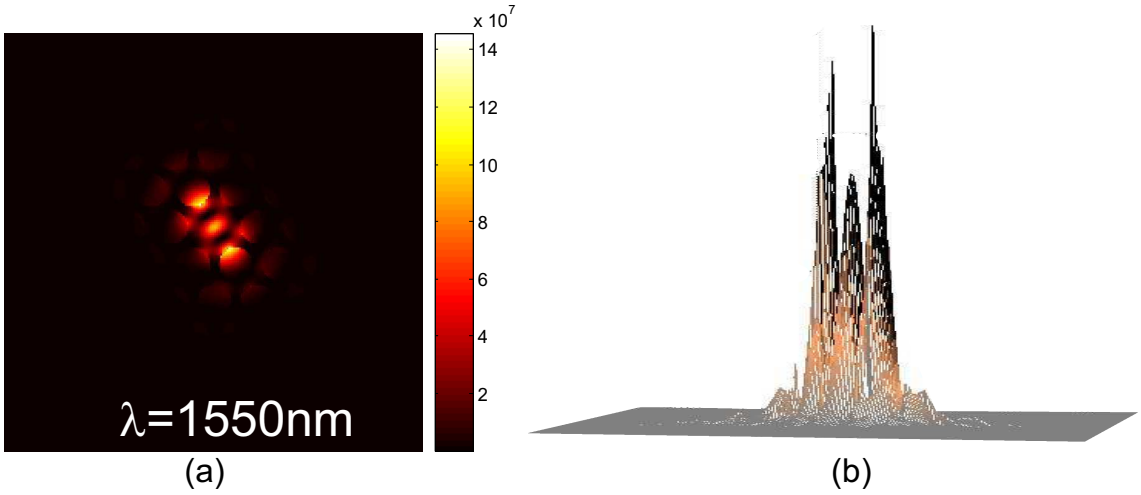


Fig. 4.34 – (a) Distribution du champ électrique dans la cavité à $\lambda = 1550$ nm obtenue par FDTD. (b) Une vue tridimensionnelle de la distribution du champ.

du lobe centrale et qui correspondent au champ électrique localisé dans les six trous qui entourent le défaut. Une distinction apparait au niveau de l'intensité des deux lobes qui entourent la cavité et les deux lobes dans la direction du guide qui sont moins intenses que les prédictions théoriques. Cette différence s'explique par une convolution de la pointe avec la structure. La pointe SNOM, ayant une forme gaussienne de diamètre 175 nm, est convoluée avec la figure 4.34(a). Le résultat est représenté dans la figure 4.35(c) et (d). A partir de ce résultat nous avons déterminé le rapport d'intensité entre les deux points b1 et b2 qui représentent respectivement le maximum d'intensité au niveau du défaut et l'intensité au niveau d'un trous voisin (c.f. figure 4.35(d). Ainsi, nous avons obtenus $\frac{I_{b1}}{I_{b2}}$=6.7 qui est comparé avec le résultat expérimental $\frac{I_{a1}}{I_{a2}}$=6.27 déterminé pour les deux points a1 et a2 (voir figure 4.35(b)).

Une autre étude est réalisée pour comparer la largeur à mi-hauteur de l'intensité pour deux coupes différentes : une suivant ΓK et une autre suivant ΓM (c.f. figure 4.35(b) et (d)). Les résultats obtenus sont montrés respectivement dans les figures 4.35(e) et (f). Pour la coupe ΓK, on obtient FWHM_{exp}=700 nm obtenue à partir de l'image expérimentale et FWHM_{th}=644 nm obtenue à partir de l'image de convolution. En addition, pour la coupe ΓM on obtient FWHM_{exp}=715 nm et FWHM_{th}=734 nm. Les deux études réalisées ci-dessous confirment la présence d'une résonance de la cavité à λ=1540 nm.

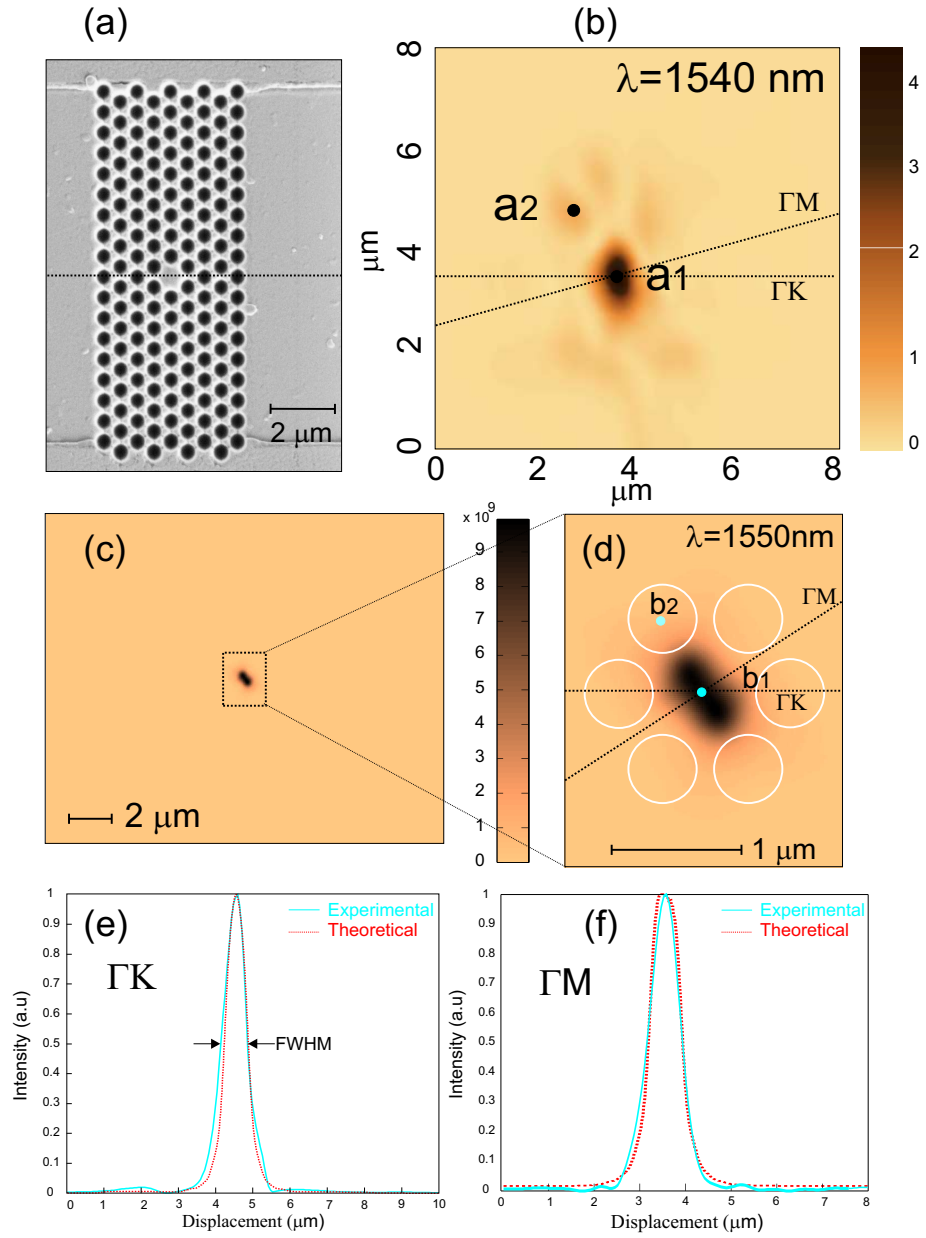


Fig. 4.35 – (a) Image MEB de la structure étudiée. (b) Image optique obtenue par les caractérisation champ proche. (c) et (d) Image théorique de la distribution du champ électrique dans la cavité après une convolution par une gaussienne de diamètre 175 nm. (e) Comparaison entre théorie et expérience pour la largeur à mi hauteur de l'intensité du lobe central d'une coupe (e) ΓK (f)ΓM.

4.6 Conclusion

En conclusion, nous avons fabriqué et caractérisé des cavités photoniques sur des guides d'ondes en niobate de lithium. Nous avons aussi démontré que les spectres de transmis-

sion des cavités réalisées par FIB coïncident avec les prédictions théoriques. Nous avons démontré la présence de bandes interdites photoniques dans le proche infra-rouge et dans l'infra-rouge moyen. Par un même banc de mesure nous avons démontré la stabilité et la reproductibilité de nos mesures et regardant la réponse spectrale de deux cavités SHD où on a mesuré expérimentalement le décalage en longueur d'onde ($\Delta\lambda$=4 nm) et qui correspond aux prédictions théoriques ($\Delta\lambda$=6 nm). Les mesures en réflexion nous ont permis d'évaluer l'effet de la cavité photonique sur les spectres. En considérant que les oscillations dans les spectres de transmission et de réflexion représentent un effet de Fabry-Pérot nous avons calculé les différentes longueurs correspondantes et qui coïncident avec les valeurs de base. Une dernière étude champ proche à été réalisée pour vérifier l'excitation du mode cavité.

Nous pouvons conclure de ces résultats expérimentaux qu'il y a bien un confinement du champ électrique dans les cavités LN. Par contre, si on veut obtenir un pic de transmission à la longueur d'onde de résonance, les guides de 12 μm sont inadaptés : un meilleur couplage est requis entre mode optique et mode photonique.

Conclusion

Conclusion

Les cavités photoniques sont des systèmes prometteurs pour contrôler la propagation de la lumière à une échelle nanométrique. Ils pourront servir de vecteurs entre les circuits intégrés électroniques et les futurs circuits intégrés photoniques. Dans ce travail, nous avons essentiellement étudié les cavités photoniques sur niobate de lithium, un matériau très utilisé pour les applications en télécommunication. De même, en raison de leurs propriétés très intéressantes, les cavités photoniques forment une des briques du monde des capteurs photoniques alliant une grande sensibilité et de très petites surfaces d'interactions.

Dans la première partie de ce travail, nous avons développé les outils numériques utilisés dans cette thèse. Nous nous sommes intéressés à la méthode des ondes planes (PWE) et à la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD). La méthode des ondes planes est basée sur la résolution des équations de Maxwell en utilisant le théorème de Bloch. Elle nous a permis de déterminer les structures de bandes des différentes configurations étudiées. Elle nous a également permis de déterminer les paramètres géométriques optimaux à partir de la carte de bandes interdites photoniques. Les cavités photoniques ont été étudiées numériquement par la méthode de "Supercell". La méthode FDTD est quant à elle basée sur la résolution des équations de Maxwell par la discrétisation de l'espace et du temps. L'algorithme de Yee est utilisé pour le maillage spatial et temporel de la fenêtre de calcul. Cet algorithme est suffisamment robuste car il permet de calculer simultanément

les champs électrique et magnétique. En plus, nous avons utilisé les couches absorbantes (PML) pour éviter les réflexions parasites qui fausseraient le calcul, et nous avons intégré un modèle de dispersion de Lorentz dans le code FDTD pour tenir compte de l'aspect dispersif des matériaux.

Dans la seconde partie, nous nous sommes intéressés à l'application des cavités photoniques pour la détection de gaz. Nous avons développé et analysé une nouvelle méthode de détection en tenant compte de l'absorption des couches sensibles déposées à la surface des cavités photoniques. Ces dernières sont constituées de trous d'air entourés par une couche de porphyrine sensible et sélective au benzène. Une étude théorique, réalisée par la méthode des ondes planes a permis de déterminer la sensibilité de la cavité à la variation de l'épaisseur des couches. Il a été démontré qu'une variation de 1 nm de l'épaisseur de la couche induit une variation de la position du pic de résonance de la cavité de 0.5 nm. La structure est ensuite étudiée par la méthode FDTD. Les paramètres de la structure ont été choisis pour que le pic de résonance de la cavité se coïncide avec le pic d'absorption de la couche de porphyrine à $\lambda = 420nm$. L'avantage de cette méthode réside dans le fait qu'on améliore la sensibilité de la structure photonique à la variation de l'indice de réfraction et de l'épaisseur de la couche. Ce modèle démontre également l'influence de l'absorption de la couche sur l'intensité du pic de résonance de la cavité. Cette variation est estimée à 23% en présence de 50 ppm de benzène.

Dans la dernière partie de cette thèse, nous avons démontré la faisabilité des cavités photoniques ayant un pic de résonance à $\lambda = 1550nm$. Dans un premier temps, des simulations nous ont permis de déterminer des paramètres géométriques technologiquement réalisables et offrant des bandes interdites avec un faible pic de résonance en transmission, mais un fort "anti-pic" en réflexion et un bon confinement du champ EM dans la cavité. De nombreuses expériences sont venues compléter et valider ce travail théorique. Un grand nombre de structures a ainsi pu être fabriqué par gravure ionique à la centrale technologique MIMENTO de l'institut FEMTO-ST. Les cavités photoniques ont ensuite été caractérisées en transmission. Les résultats expérimentaux ont démontré la présence

de bandes interdites photoniques mais la présence du pic de résonance de la cavité n'a pas pu être mis en évidence en champ lointain, car le mode optique d'entrée est trop large pour permettre un bon couplage avec le mode de cavité. Nous avons poursuivi nos tests expérimentaux par des mesures en réflexion qui ont permis de mettre en évidence le caractère réflecteur du cristal photonique dans la bande interdite. La rélexion sur le cristal photonique reste néanmoins faible, ce qui confirme encore une fois la necessité d'optimiser le couplage entre mode optique et cristal photonique. Pour finaliser le travail, des mesures en microscopie optique en champ proche en mode de collection ont été faites. La caractérisation SNOM a mis en évidence la structure du champ électrique à la surface de la cavité photonique. Cette distribution expérimentale correspond à la structure spatiale théorique du champ calculé à l'aide de notre code FDTD. Cette caractérisation a permis de montrer l'existence du mode de résonance dans les cavités photoniques.

Perspectives

Pour remonter au problème de la présence du pic de résonance dans la bande interdite photonique en géométrie de guides d'ondes, nous avons étudié théoriquement l'effet de la largeur du guide optique sur l'intensité du pic de résonance. La figure 4.36 montre la variation de la transmission du pic de résonance pour différentes largeurs de guides. D'après les simulations FDTD, nous pouvons déduire que pour une largeur du guide de 3μm le pic de résonance peut atteindre une transmission de 42%.

Une largeur d'un guide d'onde classique sur niobate de lithium de 3μm est assez difficile à réaliser pour avoir un guide monomode à 1550nm. Pour s'affranchir de ce problème nous avons adopté l'idée de réaliser des guides ridges pour résoudre le problème lié au confinement du mode guidé. Le procédé de fabrication des guides ridges, soit sur des guides obtenus par diffusion titane, soit par échange protonique avec recuit, est le suivant : au début les guides sont fabriqués sur un wafer de niobate de lithium d'épaisseur 1mm. Puis, les ridges sont réalisés à l'aide d'une scie de type DISCO DAD 441. La figure 4.37 représente

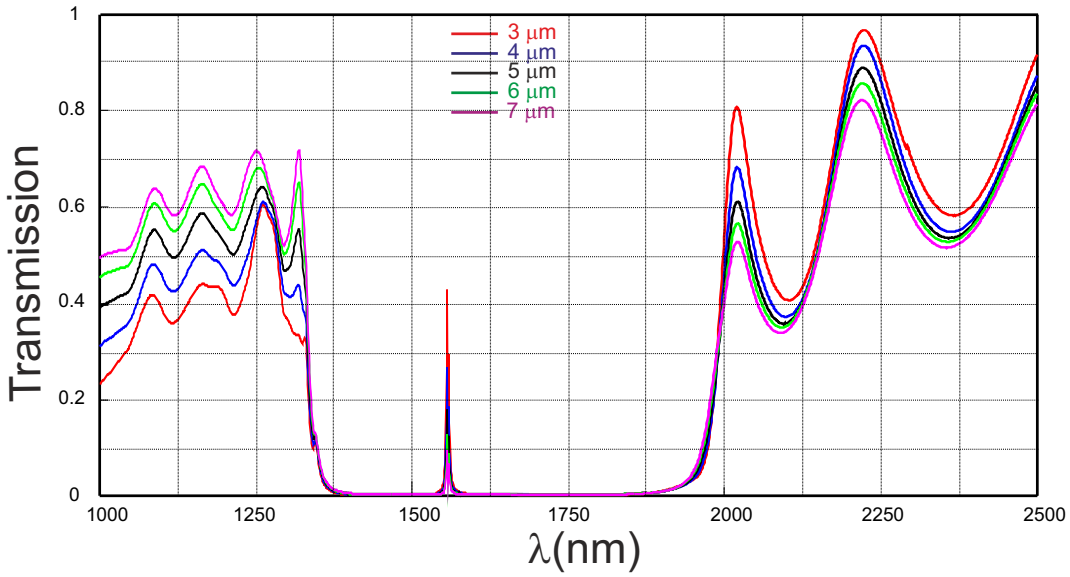


Fig. 4.36 – Spectres théoriques obtenus par FDTD pour la cavité $H1_{04}$ pour différentes largeur de guide.

des images MEB de quelques ridges réalisés en salle blanche par Blandine GUICHARDAZ, Gwenn ULLIAC et Nadège COURJAL.

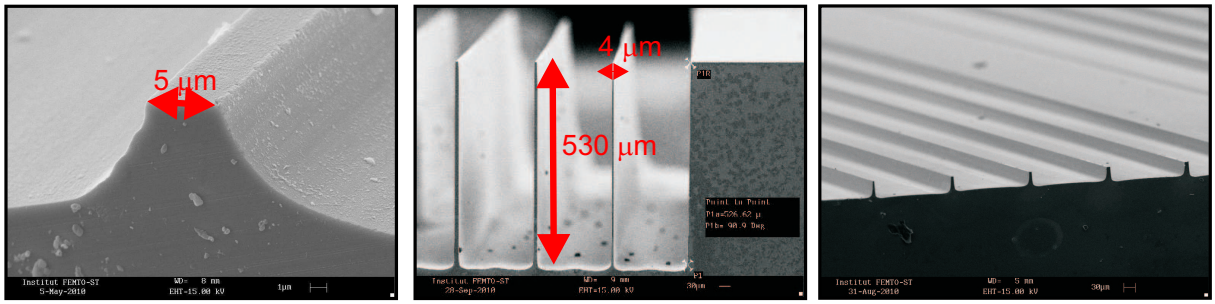


Fig. 4.37 – Images MEB des ridges sur des guides obtenus par diffusion titane dans le niobate de lithium.

Une fois les ridges réalisés, des tests ont été réalisés pour observer l'aspect modal de ces guides. La figure **??** montre les résultats expérimentaux d'un ridge réalisé sur un guide obtenu par diffusion titane. La largeur du guide est de 3μm comme le montre la figure **??**(a). Le mode guidé à λ=1550nm, représenté dans la figure **??**(b), est visualisé sur une caméra IR. La figure **??**(c) représente une coupe au niveau du centre du mode guidé afin

d'obtenir la largeur à mi-hauteur du mode guidé estimée à 3.6μm.

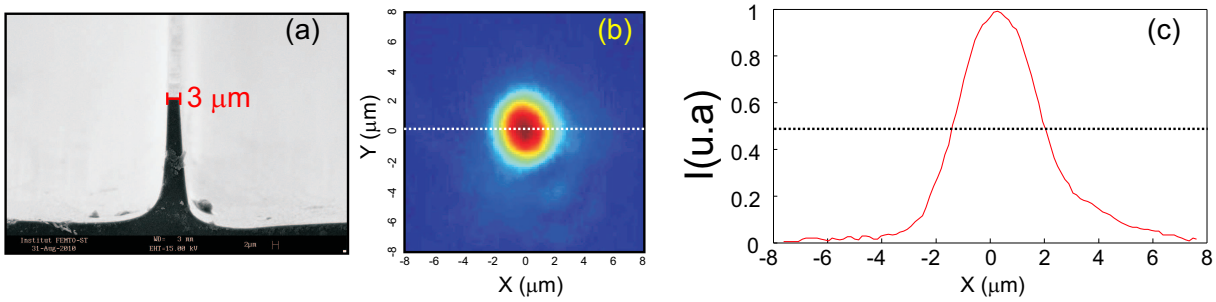


FIG. 4.38 – (a) Image MEB d'un ridge de 3μm de largeur. (b) Image du mode guidé obtenu à λ=1500 nm. (c) Coupe horizontale au centre du mode guidé avec une largeur à mi-hauteur de 3.6μm.

Ainsi, nous avons résolu un problème majeur lié au couplage dans les guides d'ondes sur niobate de lithium par la réalisation des ridges. Nous espérons, que la réalisation des cavités sur les ridges nous permettra d'obtenir le mode de cavité en transmission avec un fort coefficient de transmission, ceci ouvrira la voie à plusieurs applications. Les cavités pourront ainsi avoir un grand facteur de qualité permettant d'augmenter la sensibilité des cavités pour les applications capteurs. De même, l'application des cavités sur niobate de lithium en tant que modulateurs électro-optiques peut être exploité et qui est le sujet de thèse de Huihui LU. De même, en exploitant le caractère pyroélectrique du niobate de lithium, nous pouvons envisager des capteurs de température très miniatures.

Bibliographie

[1] W. Shockley, "Circuit element utilizing semiconductive material," *U.S. Patent*, vol. 2 569 347, 1948.

[2] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, and J. D. Joannopoulos, "Donor and acceptor modes in photonic band structure," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, no. 24, pp. 3380–3383, Dec 1991.

[3] J. N. W. John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson and R. D. Meade, *Photonic Crystals : Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, 2008.

[4] Y. Zhao, K. Wostyn, G. de Schaetzen, K. Clays, L. Hellemans, A. Persoons, M. Szekeres, and R. A. Schoonheydt, "The fabrication of photonic band gap materials with a two-dimensional defect," *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 21, pp. 3764–3766, 2003.

[5] E. Yablonovitch, "Photonic band-gap structures," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 10, no. 2, pp. 283–295, 1993.

[6] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, H. I. Smith, and E. P. Ippen, "Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides," *Nature*, vol. 390, pp. 143–145, 1997.

[7] T. Sunner, T. Stichel, S.-H. Kwon, T. W. Schlereth, S. Hofling, M. Kamp, and A. Forchel, "Photonic crystal cavity based gas sensor," *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 26, p. 261112, 2008.

[8] E. Chow, A. Grot, L. W. Mirkarimi, M. Sigalas, and G. Girolami, "Ultracompact biochemical sensor built with two-dimensional photoniccrystal microcavity," *Opt. Lett.*, vol. 29, no. 10, pp. 1093–1095, 2004.

[9] M. R. Lee and P. M. Fauchet, "Two-dimensional silicon photonic crystal based biosensing platform for protein detection," *Opt. Express*, vol. 15, no. 8, pp. 4530–4535, 2007.

[10] I. Leray, M.-C. Vernières, and C. Bied-Charreton, "Porphyrins as probe molecules in the detection of gaseous pollutants : detection of benzene using cationic porphyrins in polymer films," *Sens. Actuators B*, vol. 54, pp. 243 – 251, 1999.

[11] F. Lacour, N. Courjal, M.-P. Bernal, A. Sabac, C. Bainier, and M. Spajer, "Nanostructuring lithium niobate substrates by focused ion beam milling," *Optical Material*, vol. 27, p. 1421, 2004.

[12] [Online]. Available : http ://www.crystaltechnology.com/

[13] L. Rayleigh, "On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with a periodic structure," *Philosophical Magasine Series 5*, vol. 24, pp. 145–159, 1887.

[14] J.W.S. Rayleigh, "On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by prof. stokes," *Philosophical Magasine Series 5*, vol. 26, pp. 256–265, 1888.

[15] S. John, "Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, no. 23, pp. 2486–2489, Jun 1987.

[16] E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, no. 20, pp. 2059–2062, May 1987.

[17] K. Sakoda, *Optical properties of photonic crystals*, G. Springer-Verlag, Ed. Springer-Verlag, Germany, 2001.

[18] K. Busch, S. Lölkes, R.B. Wehrspohn, and H. Föll, Ed., *Photonic Crystals : Advances in Design, Fabrication, and Characterization.* Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.

[19] C. Bowden and J. D. Ed., "Development and applications of materials exhibiting photonic band gaps," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 10, no. 2, pp. 280–280, 1993. [Online]. Available : http ://josab.osa.org/abstract.cfm ?URI=josab-10-2-280

[20] A. S. Ed., "Electromagnetic crystal structures : design, synthesis, and applications," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 17 (11), 1999.

[21] J. P. Dowling, "Photonic & sonic band-gap and metamaterial bibliography." [Online]. Available : http ://phys.lsu.edu/ jdowling/pbgbib.html

[22] Y. Akahane, T. Asano, B.S. Song, and S. Noda, "High-q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal," *Nature*, vol. 425, pp. 944–947, 2003.

[23] T. Asano, B.-S. Song, and S. Noda, "Analysis of the experimental q factors (1 million) of photonic crystal nanocavities," *Opt. Express*, vol. 14, no. 5, pp. 1996–2002, 2006.

[24] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, and F. I. Baida, "Experimental and theoretical characterization of a lithium niobate photonic crystal," *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 24, p. 241101, 2005.

[25] M.-P. Bernal, N. Courjal, J. Amet, M. Roussey, and C. Hou, "Lithium niobate photonic crystal waveguides : Far field and near field characterisation," *Optics Communications*, vol. 265, no. 1, pp. 180 – 186, 2006.

[26] P. Yeh, A. Yariv, and C.-S. Hong, "Electromagnetic propagation in periodic stratified media. i. general theory," *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 67, no. 4, pp. 423–438, 1977.

[27] S. Fan, J. D. Joannopoulos, J. N. Winn, A. Devenyi, J. C. Chen, and R. D. Meade, "Guided and defect modes in periodic dielectric waveguides," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 12, no. 7, pp. 1267–1272, 1995.

[28] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, T. Krauss, V. Bardinal, and U. Oesterle, "Demonstration of cavity mode between two-dimensional photonic-crystal mirrors," *Electronics Letters*, vol. 33, no. 23, pp. 1978–1980, 1997.

[29] A. Scherer, O. Painter, B. D'Urso, R. Lee, and A. Yariv, "Ingaasp photonic band gap crystal membrane microresonators," vol. 16, no. 6. AVS, 1998, pp. 3906–3910.

[30] S. Noda, M. Yokoyama, M. Imada, A. Chutinan, and M. Mochizuki, "Polarization mode control of two-dimensional photonic crystal laser by unit cell structure design," *Science*, vol. 293, no. 5532, pp. 1123–1125, 2001.

[31] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus, and I. Kim, "Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser," *Science*, vol. 284, no. 5421, pp. 1819–1821, 1999.

[32] M. Meier, A. Mekis, A. Dodabalapur, A. Timko, R. E. Slusher, J. D. Joannopoulos, and O. Nalamasu, "Laser action from two-dimensional distributed feedback in photonic crystals," *Applied Physics Letters*, vol. 74, no. 1, pp. 7–9, 1999.

[33] T. Baba, N. Fukaya, and J. Yonekura, "Observation of light propagation in photonic crystal optical waveguides with bends," *Electronics Letters*, vol. 35, no. 8, pp. 654–655, 1999.

[34] A. Chutinan, M. Mochizuki, M. Imada, and S. Noda, "Surface-emitting channel drop filters using single defects in two-dimensional photonic crystal slabs," *Applied Physics Letters*, vol. 79, no. 17, pp. 2690–2692, 2001.

[35] R. Wehrspohn, T. Geppert, S. schweizer, A. Rhein, C. Jamois, and A. Lambrecht, "Photonic crystal gas sensors," *International conference on optical fibre sensors No17, Bruges , BELGIQUE*, vol. 5855, pp. 24–29, 2005.

[36] C. Kang and S. M. Weiss, "Photonic crystal with multiple-hole defect for sensor applications," *Opt. Express*, vol. 16, no. 22, pp. 18 188–18 193, 2008.

[37] T. Stomeo, M. Grande, A. Qualtieri, A. Passaseo, A. Salhi, M. D. Vittorio, D. Biallo, A. D'orazio, M. D. Sario, V. Marrocco, V. Petruzzelli, and F. Prudenzano, "Fabrication of force sensors based on two-dimensional photonic crystal technology," *Microelectronic Engineering*, vol. 84, no. 5-8, pp. 1450 – 1453, 2007, proceedings of the 32nd International Conference on Micro- and Nano-Engineering.

[38] S.-H. Kwon, T. Sünner, M. Kamp, and A. Forchel, "Optimization of photonic crystal cavity for chemical sensing," *Opt. Express*, vol. 16, no. 16, pp. 11 709–11 717, 2008.

[39] S. Chakravarty, J. Topol'ancik, P. Bhattacharya, S. Chakrabarti, Y. Kang, and M. E. Meyerhoff, "Ion detection with photonic crystal microcavities," *Opt. Lett.*, vol. 30, no. 19, pp. 2578–2580, 2005.

[40] N. Skivesen, A. Têtu, M. Kristensen, J. Kjems, L. H. Frandsen, and P. I. Borel, "Photonic-crystal waveguide biosensor," *Opt. Express*, vol. 15, no. 6, pp. 3169–3176, 2007.

[41] B. Schmidt, V. Almeida, C. Manolatou, S. Preble, and M. Lipson, "Nanocavity in a silicon waveguide for ultrasensitive nanoparticle detection," *Applied Physics Letters*, vol. 85, no. 21, pp. 4854–4856, 2004.

[42] X. Wang, Z. Xu, N. Lu, J. Zhu, and G. Jin, "Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure," *Optics Communications*, vol. 281, no. 6, pp. 1725 – 1731, 2008.

[43] S. Nicoletti, L. Dori, G. C. Cardinali, and A. Parisini, "Gas sensors for air quality monitoring : realisation and characterisation of undoped and noble metal-doped sno2 thin sensing films deposited by the pulsed laser ablation," *Sensors and Actuators B : Chemical*, vol. 60, no. 2-3, pp. 90 – 96, 1999.

[44] C. Cantalini, W. Wlodarski, Y. Li, M. Passacantando, S. Santucci, E. Comini, G. Faglia, and G. Sberveglieri, "Investigation on the o3 sensitivity properties of wo3 thin films prepared by sol-gel, thermal evaporation and r.f. sputtering techniques," *Sensors and Actuators B : Chemical*, vol. 64, no. 1-3, pp. 182 – 188, 2000.

[45] N. Miura, G. Lu, and N. Yamazoe, "High-temperature potentiometric/amperometric nox sensors combining stabilized zirconia with mixed-metal oxide electrode," *Sensors and Actuators B : Chemical*, vol. 52, no. 1-2, pp. 169 – 178, 1998.

[46] R. Knake and P. C. Hauser, "Sensitive electrochemical detection of ozone," *Analytica Chimica Acta*, vol. 459, no. 2, pp. 199 – 207, 2002.

[47] M. Lafosse and M. Savignac, "Analyse par chromatographie en phase gazeuse de composés synthetisés à grande dilution," *Chromatographia*, vol. 6, pp. 415–419, 1973, 10.1007/BF02281018.

[48] R. Rich and D. Myszka, "Survey of the year 2006 commercial optical biosensor literature," *Journal of Molecular Recognition*, vol. 20, pp. 300–366, 2007.

[49] X. Fan, Ed., *Advanced Photonic Structures for Biological and Chemical Detection*. Springer, 2009.

[50] J. B. Pendry and P. M. Bell, *Photonic band gaps and localization*, C. Soukoulis, Ed. Plenum Press, NY, 1993.

[51] K. Bush, C. Chan, and C. M. Soukoulis, *Photonic band gap materials*, C. M. SOUKOULIS, Ed. Plenum Press, NY, 1996.

[52] T. G. E. yablonovitch and K. Leung, *Physical review B*, vol. 67, p. 2295, 1991.

[53] S. F. A. Mekis and J. D. Joannopoulos, "Absorbing boundary conditions for fdtd simulations of photonic crystal waveguides," *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 9, p. 502, 1999.

[54] F. Brechet, J. Marcou, D. Pagnoux, and P. Roy, "Complete analysis of the characteristics of propagation into photonic crystal fibers, by the finite element method," *Optical Fiber Technology*, vol. 6, no. 2, pp. 181 – 191, 2000.

[55] A. Figotin and Y. A. Godin, "The computation of spectra of some 2d photonic crystals," *Journal of Computational Physics*, vol. 136, no. 2, pp. 585 – 598, 1997.

[56] K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media," *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 14, p. 302, 1966.

[57] J.-P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *Journal of Computational Physics*, vol. 114, no. 2, pp. 185 – 200, 1994.

[58] AllenTaflove, *Computational Electrodynamics : The Finite - Difference Time - Domain*. Artech House, Incorporated, july 2005.

[59] A. Vial, A.-S. Grimault, D. Macías, D. Barchiesi, and M. L. de la Chapelle, "Improved analytical fit of gold dispersion : Application to the modeling of extinction spectra with a finite-difference time-domain method," *Phys. Rev. B*, vol. 71, no. 8, p. 085416, Feb 2005.

[60] F. Baida, D. V. Labeke, Y. Pagani, B. Guizal, and M. A. Naboulsi, "Waveguiding through a two-dimensional metallic photonic crystal," *J. Microsc.*, vol. 2, pp. 144–148, 2004.

[61] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, D. V. Labeke, F. I. Baida, and R. Salut, "Electro-optic effect exaltation on lithium niobate photonic crystals due to slow photons," *Applied Physics Letters*, vol. 89, no. 24, p. 241110, 2006.

[62] N. Courjal, S. Benchabane, J. Dahdah, G. Ulliac, Y. Gruson, and V. Laude, "Acousto-optically tunable lithium niobate photonic crystal," *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 13, p. 131103, 2010.

[63] N. Courjal, M.-P. Bernal, G. Ulliac, J. Dahdah, S. Benchabane, and J.-M. Merolla, "Linbo3 acousto-optical and electro-optical micromodulators," *Journal of the European Optical Society*, vol. 4, p. 09018, 2009.

[64] D. A. Bryan, R. Gerson, and H. E. Tomaschke, "Increased optical damage resistance in lithium niobate," *Appl Phys. Lett.*, vol. 44, pp. 847–849, 1984.

[65] D. E. Zelmon, D. L. Small, and D. Jundt, "Infrared corrected sellmeier coefficients for congruently grown lithium niobate and 5 mol.% magnesium oxide –doped lithium niobate," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 14, no. 12, pp. 3319–3322, 1997.

[66] K. Ohta and H. Ishida, "Comparison among several numerical integration methods for kramers-kronig transformation," *Appl. Spectrosc.*, vol. 42, pp. 952–957, 1988.

[67] J. Dahdah, N. Courjal, and F. I. Baida, "Analysis of a photonic crystal cavity based on absorbent layer for sensing applications," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 27, no. 2, pp. 305–310, 2010.

[68] G. W. Burr, S. Diziain, and M.-P. Bernal, "The impact of finite-depth cylindrical and conical holes in lithium niobatephotonic crystals," *Opt. Express*, vol. 16, no. 9, pp. 6302–6316, 2008.

[69] M. Roussey, F. I. Baida, and M.-P. Bernal, "Experimental and theoretical observations of the slow-light effect on a tunable photonic crystal," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 24, pp. 1416–1422, 2007.

[70] I. M. White and X. Fan, "On the performance quantification of resonant refractive index sensors," *Opt. Express*, vol. 16, no. 2, pp. 1020–1028, 2008.

[71] J. Amin, B. Dussardier, T. Schweizer, and M. Hempstead, "Spectroscopic analysis of er3+ transitions in lithium niobate," *Journal of Luminescence*, vol. 69, no. 1, pp. 17 – 26, 1996.

[72] A. Polman, "Erbium implanted thin film photonic materials," *Journal of Applied Physics*, vol. 82, no. 1, pp. 1–39, 1997.

[73] D. P. Birnie, "Analysis of diffusion in lithium niobate," *Journal of Materials Science*, vol. 28, pp. 302–315, 1993, 10.1007/BF00357800.

[74] D. H. Jundt and G. Foulon, *Properties of Lithium Niobate : Boules of LiNbO3 congruently grown by the Czochralski technique*, L. U. . The Institution of Electrical Engineers(INSPEC, Ed. (INSPEC, , London, UK, 2002), 2002.

[75] A.A. Ballman, J. Am. Ceramic Soc. 48(2), "Growth of piezoelectric and ferroelectric materials by the czochraiski technique," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 48, p. 112, 1965.

[76] T. Volk and M. Wöhlecke, *Lithium Niobate : Defects, Photorefraction and Ferroelectric Switching*. Springer, 2008.

[77] J.L. Jackel, C.R. Rice, and J.J. Veselka, "Proton exchange for high index waveguides in linbo3," *Applied Physics Letters*, vol. 41, p. 607, 1982.

[78] M.D. Micheli, J. Botineau, S. Neveu, P. Sibillot, D. B. Ostrowsky, and M. Papuchon, "Independent control of index and prońls in proton exchanged linbo3 guides," *Optics Letters*, vol. 8, p. 114, 1983.

[79] F. Zhou, A. M. Matteo, M. de la Rue, and C.N. Ironside, "Swelling characteristics of proton-exchange linbo3 waveguides," *Electronics Letters*, vol. 28, p. 87, 1992.

[80] S. Fouchet, A. Carenco, C. Daguet, and R.Gugliemi, "Wavelength dispersion of ti induced refractive index change in linbo3 as a function of diffusion parameters." *Journal of Lightwave Technology*, vol. LT-5, p. 700, 1987.

[81] Starke, G. Bava, and I. Montrosset., "Guided modes of ti : Linbo3 channel waveguides. a novel quasi-analytical technique in comparison with the scalar finite-element method channel." *Journal of Lightwave Technology*, vol. 6, p. 1126, 1988.

[82] J. L. Jackel, R. E. Howard, E.L. Hu, and S. P. Lyman, "Reactive ion-etching of linb03." *Applied Physics Letters*, vol. 38, p. 907, 1981.

[83] P. S. Chung, C.M. Horwitz, and W.L. Guo, "Dry etching characteristics of linb03," *Electronics Letters*, vol. 22, p. 484, 1986.

[84] V. Foglietti, E. Cianci, D. Pezzetta, C. Sibiliab, M. Marangonic, R. Osellamec, and C.R. Ramponi, "Fabrication of band-gap structures in planar nonlinear waveguides for second harmonic generation," *Microelectronic Engineering*, vol. 67-68, p. 742, 2003.

[85] E. H. Synge, "Suggested method for extending microscopic resolution into the ultra-microscopic region," *Philosophical Magazine*, vol. 6, p. 356, 1928.

[86] D. Courjon, K. Sarayeddine, and M. Spajer, "Scanning tunneling optical microscopy," *Optics Communication*, vol. 71, p. 23, 1989.

[87] M. roussey, "Cristaux photoniques commandables en niobate de lithium : Simulations et caractérisations," Ph.D. dissertation, Université de franche comté, 2007.

[88] D. Gérard, "Etude en champ proche optique et en champ lointain de composants périodiquement nanostructurés : cristaux photoniques et tamis à photons," Ph.D. dissertation, Université de Bourgogne, Dijon, 2004.

[89] N. Louvion, "Microscopie en champ proche optique de structure à base de cristaux photoniques," Ph.D. dissertation, Ecole Centrale de Lyon, 2005.

Annexe A

Publications et Communications

A.1 Publications

REVUES INTERNATIONALES AVEC COMITE DE LECTURE

1. **J. Dahdah, N. Courjal, F. I. Baida**, *Analysis of a photonic crystal cavity based on absorbent layer for sensing applications*, J. Opt. Soc. Am. B, vol. 27, No. 2, 305-310 (2010).

Abstract :

We present a photonic crystal (PhC) cavity based on a single hole defect filled with a sensitive absorbent layer for sensing applications. A preliminary study performed with the plane wave expansion method shows that the resonance peak of the cavity mode is 0.5 nm shifted for a 1 nm thickness variation of the sensitive layer. A Lorentz dispersion model implemented in a two dimensional finite difference time domain homemade code shows that the absorption of the layer can be exploited for enhancing the sensitivity of the sensor. With the proposed geometry, we find that a variation in the refractive index of 10^{-7} leads to a variation in the transmittivity of 23% at the resonance peak. This study is proposed for the development of a compact benzene sensor on a MgO doped lithium niobate PhC.

2. **N. Courjal, S. Benchabane, J. Dahdah, G. Ulliac, Y. Gruson, V. Laude**, *Acousto-optically tunable lithium niobate photonic crystal*, Appl. Phys. Let., vol. 96, 131103 (2010).

Abstract :
We report on an active two-dimensional lithium niobate photonic crystal (PhC) driven by stationary Rayleigh surface acoustic waves. The configuration relies on two interdigital transducers that modulate the refractive index through the acousto-optical effect. Highly efficient, compact acousto-optical PhCs with an active length of only 13 μm and a driving electrical power of 20 mW have been fabricated and characterized. Experiments show that an enhancement factor of the elasto-optical interaction of the order of 61 is obtained thanks to slow light effects in the PhC.

3. **N. Courjal, M.-P. Bernal, G. Ulliac, J. Dahdah, S. Benchabane, J.M. Merolla** ,*$LiNbO_3$ acousto-optical and electro-optical micromodulators*, Journal of the european optical society, rapid publication 4, 09018 (2009).

Abstract :
We report on acousto-optical (AO) and electro-optical (EO) $LiNbO_3$ modulators with an active length of only 11 μm. The miniature devices are based on photonic crystal (PhC) structures that are controlled by an external effect (DC electric field or Surface Acoustic Waves). Two processes are presented for realizing the PhCs despite the resistance of the material to etching. The first method is based on direct FIB writing and can yield the fabrication of holes with depth of 3 μm and diameter of 1 μm or less. The second method consists in FIB patterning of a mask which is deposited on the substrate. This process is followed by proton exchange (PE) and reactive ion etching (RIE). Thus, structures with a diameter of 400 nm and an aspect ratio of 3 :1 have been fabricated. The methods have been applied to the fabrication of EO and AO micromodulators showing a driving voltage of 13,5 V and a driving electric power of 20 mW respectively. These developments open the way to dense integration of dynamic optical functionalities.

4. **F.I. Baida, A. Belkhir, O. Arara, E.H. Barakat, J. Dahdah, C. Chemrouk, D. Van Labeke, C. Diebold, N. Perry, M.-P. Bernal***Enhanced optical trans-*

mission by light coaxing : Mechanism of the TEM-mode excitation, Micron 41 (2010) 742Ű745.

Abstract :
This paper presents a theoretical study showing the mechanism of light transmission through opaque metallic films perforated with nanocoaxial apertures thanks to the excitation of their cutoff-free TEM (Transverse ElectroMagnetic) guided mode. Full three-dimensional Finite Difference Time Domain (3D-FDTD) together with a Body-Of-Revolution FDTD simulation results are presented and discussed in order to optimize this extraordinary transmission. Very promising findings are pointed out opening the path to the design of new devices for both nano-optic and photovoltaic applications.

A.2 Communications

CONFERENCES INTERNATIONALES AVEC COMITE DE LECTURE

1. *LiNbO3 acousto-Optical and electro-optical micromodulators*, N. Courjal, M.P. Bernal, G. Ulliac, J. Dahdah, S. Benchabane, European Optical Society Annual Meeting (EOSAM), Conférence invitée, France(2008).

2. *FIB milling for lithium niobate photonic crystals*, Courjal N., Bernal M.-P., Spajer M., Ulliac G., Salut R., Dahdah J., Benchabane S., Proceedings of the first international workshop on FIB for photonics, first international workshop on FIB for photonics Eindhoven, Pays-Bas(2008).

3. *Cristaux photoniques sur LiNbO3 : Exaltation de lŠeffet électro-optique induit par le ralentissement de la lumière*, M-P. Bernal, S. Diziain, M. Roussey, J. Amet, F.I. Baida, M. Spajer, G. Ulliac, N. Courjal, J. Dahdah, S. Benchabane, ICO 2008, Sétif, Algérie (8-10 novembre 2008) - Conférence invitée.

4. *Photonic crystal cavity based on absorbent layer for sensing application*, J. Dahdah, N. Courjal et F. Baida. Sixth International Optical Society of America Network of Students, Glasgow, United Kingdom(2009).

5. *Lithium niobate Photonic crystal cavity for chemical detection*, Dahdah J., Courjal N., Baida F.I., International Conference in optics and Optoelectronics Materials and Applications, Budapest, Hongrie(2010).

6. *Experimental and Numerical Study of Lithium Niobate Photonic Crystal Cavities - Application for Gas Sensing*, J. Dahdah, N. Courjal, G. Ulliac, M-P. Bernal and F. I. Baida, Photonic and Electromagnetic Crystal Structures (PECS-IX), Grenada, Spain (2010).

7. *Nanostructuration of lithium niobate substrates for sensing applications*, N. Courjal, J. Dahdah, G. Ulliac, B. Guichardaz, J.Y. Rauch, F. Baida, European Optical Society Annual Meeting (EOSAM), France(2010).

CONFERENCES NATIONALES AVEC COMITE DE LECTURE

1. *Cristaux photoniques commandés acoustiquement, intégrés sur niobate de lithium*, Benchabane S., Courjal N., Dahdah J., Khelfaoui N., Laude V., Salut R., Ulliac G., GDR Ondes, Pessac, France (2007).

2. *Structure photonique sur Niobate de Lithium dopé MgO pour la détection des gaz*, Dahdah J., Courjal N., Baida F., Journée Nationale d'Optique Guidé, Lannion, France(2008).

3. *Cristaux photoniques commandables : Théorie, fabrication et caractérisation*, M.P. Bernal, J. Amet, J. Dahdah, S. Diziain, M. Roussey, G. Ulliac, S. Benchabane, N. Courjal, F.I. Baida, Réunion Thématique Nanooptique, Nanosciences Grand-Est (CNANO), Troyes, France, 28-29 Avril 2008.

4. *Etude d'une cavité photonique pour la détection des gaz*, J. Dahdah, N. Courjal et F. Baida, Journée Nationale d'Optique Guidé, Lille, France(2009).

5. *Réseaux de Bragg sur niobate de lithium réalisés par nano structuration laser femtoseconde en faisceaux de Bessel non-diffractants*, F. Courvoisier, N. Courjal, J. Dahdah, P.-A. Lacourt, M. Jacquot et J. Dudley, Journée Nationale d'Optique Guidé, Lille, France(2009).

6. *Capteur électro-optiques fibré en optique intégrée sur LiNbO3 dédié à la mesure de Champs électriques*, A. Warzecha, G. Gaborit, J. Dahdah, G. Ulliac, N. Courjal, N. Grossard, H. Porte, L. Duvillaret et J.-L. Lasserre. Horizon d'optique, Lille, France(2009).

7. *Cavité photonique fonctionnalisée pour la détection des gaz*, J. Dahdah, N. Courjal, G. Ulliac et F. Baida. GDR Ondes, Paris, France (2009).

8. *Cavités photoniques en niobate de lithium : Etude théorique et expérimentale en transmission et en réflexion.* J. Dahdah, N. Courjal et F. Baida, GDR ondes-GT2, Groupe thématique " Micro, nano-structures et dispositifs de l'optique aux micro-ondes", Lille, France(2010).

9. *Etude et réalisation des cavités photoniques sur niobate de lithium*, J. Dahdah, N. Courjal, G. Ulliac, F.I. Baida, Journée Nationale d'Optique Guidé, Besançon, France(2010).

DIVERS

1. École d'été CNANO Île de France, Paris, France(2008).

2. École d'été des Houches, Les Houches, France(2009).

$LiNbO_3$ acousto-optical and electro-optical micromodulators

N. Courjal nadege.bodin@univ-fcomte.fr University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

M. P. Bernal University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

G. Ulliac University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

J. Dahdah University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

S. Benchabane University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

J-M. Merolla University of Franche-Comté, FEMTO-ST Institute, Besançon, 25000, France

We report on acousto-optical (AO) and electro-optical (EO) $LiNbO_3$ modulators with an active length of only 11 μm. The miniature devices are based on photonic crystal (PhC) structures that are controlled by an external effect (DC electric field or Surface Acoustic Waves). Two processes are presented for realizing the PhCs despite the resistance of the material to etching. The first method is based on direct FIB writing and can yield the fabrication of holes with depth of 3 μm and diameter of 1 μm or less. The second method consists in FIB patterning of a mask which is deposited on the substrate. This process is followed by proton exchange (PE) and reactive ion etching (RIE). Thus, structures with a diameter of 400 nm and an aspect ratio of 3:1 have been fabricated. The methods have been applied to the fabrication of EO and AO micromodulators showing a driving voltage of 13,5 V and a driving electric power of 20 mW respectively. These developments open the way to dense integration of dynamic optical functionalities. [DOI: 10.2971/jeos.2009.09018]

Keywords: scattering loss, sidewall roughness, bent waveguides, silica-on-silicon, indium phosphide

1 INTRODUCTION

Recently, great efforts have been dedicated to the fabrication of tunable photonic crystal (PhC) devices, which offer promising ways of integrating optical functionalities into miniature circuits. Micron-size electro-optical (EO) interferometers or resonators have been demonstrated on silicon substrates, stimulated by the perspective of integrating compact high frequency modulators on miniature circuits for telecommunication systems. [1, 2]. Acousto-optical (AO) micromodulators have also been the subject of recent developments on GaAs or silicon substrates [3, 4] and offer attractive possibilities for the development of new acousto-photonic or photo-phononic devices [5].

Here we propose a new configuration for modulating light, which can be employed for either acousto-optic or electro-optic modulation. It relies on the use of lithium niobate ($LiNbO_3$) substrates. Due to its high electro-optical, acousto-optical and nonlinear coefficients, $LiNbO_3$ represents indeed an excellent candidate for the realization of dynamic PhC structures.

The fabrication of $LiNbO_3$ PhCs represents however a challenging task, due to the well known resistance of the material to standard machining methods. Different approaches have been conducted for achieving nanostructures with depths larger than 1 μm. Domain engineering followed by wet etching represents a possible way of fabricating submicrometric holes [6], but the method is limited to Z-cut substrates. An alternative relies on ultrafast laser machining [7], but its application to PhCs requires the laser spot to be focused near the diffraction limits. Another common approach consists in preparing the etching of the substrate by modifying the crystal lattice [8]–[13]. Particularly, the method based on proton exchange followed by Reactive Ion Etching (RIE) or Inductively Coupled-Plasma-RIE (ICP-RIE) has shown to be applicable to the fabrication of PhCs [11, 12]. Such a method implies however a consequent number of steps, including the patterning of the mask by electron beam lithography followed by RIE, the proton exchange step and finally the dry etching step. Here we propose to write the patterns directly in the mask by Focused Ion Beam (FIB) milling, which avoids the e-beam lithography and the RIE of the mask. An alternative approach consists in a direct FIB patterning of the substrate [17]. Both methods are suitable for the etching of either X-cut or Z-cut substrates.

The possibility of realizing miniature $LiNbO_3$ components arises with these fabrication methods. Here we show the fea-

Received December 05, 2008; published April 14, 2009 ISSN 1990-2573

sibility of two particular modulators driven by EO or AO effects.

2 THEORY

The proposed devices are schematically depicted in Figures 1 and 2. They consist of a photonic crystal (PhC) integrated on a gradient index optical waveguide. The photonic structure is chosen to be simple (i.e. without any defect), which eases the fabrication processes. The purpose is to exploit the photonic gap in the transmission response of the PhC. More precisely, the PhC is designed so that an edge of the gap corresponds to the operating wavelength. The edge spectral position and consequently the output intensity are dependent on the refractive index. So a periodic array that features gaps in its band structure can become a modulator if it is submitted to an external stimulus (electric field or acoustic wave) that changes the refractive index. The electrodes surrounding the PhC in Figures 1 and 2 are dedicated to the generation of the external stimuli.

The configuration of an electro-optical $LiNbO_3$ modulator has been described in [14], and is reminded in Figure 1(a). The electrodes and the optical waveguide are designed in order to benefit from the highest electro-optic coefficient of the crystal, which is r_{33}. Hence, the electro-optic interaction is optimal if both the electrical and the optical fields are parallel to the Z-axis of the crystal. In the case of an X-cut substrate, the Z axis is in the plan of the substrate, which implies a TE-polarized light wave propagating along the Y axis (see Figure 1(a)). The electric field is made parallel to the Z-axis by coplanar electrodes placed on both sides and parallel to the optical waveguide. The realization of a Z-cut modulator would imply a TM-polarized light, and a push-pull configuration of the electrodes, with the central electrode overlaying the photonic crystal (see Figure 1(b)). Owing to the drift effects, the Z-cut configuration is however less attractive than the X-cut one. Taking for granted that the length of the active section is typically of 11 μm, there is no need of progressive electrodes for achieving large modulation bandwidth.

The basic principle of the acousto-optical modulators is schematically depicted in Figure 2(a). Here the external stimulus is a surface acoustic wave (SAW) generated by an interdigital transducer (IDT) that is placed on one side of the PhC. Due to the piezoelectric interaction in the material, an electric signal applied on the IDT generates a Rayleigh acoustic wave which propagates toward the Z-axis of the crystal. The acoustic wave locally induces a modulation of the refractive index by elasto-optic effect. The effective index of the PhC is modulated provided that the acoustic wavelength is larger than the width of the optical waveguide. The IDT is designed with a period of $p = 9$ μm, which corresponds to an acoustic wavelength of 18 μm. The width of the optical waveguide is of 7 μm. The amplitude of modulation is optimal if it corresponds to the resonance frequency of the IDT which is calculated to be 191 MHz for $p = 9$ μm.

In view of increasing the acousto-optic interaction we propose to exploit a second IDT on the opposite side of the PhC, at the

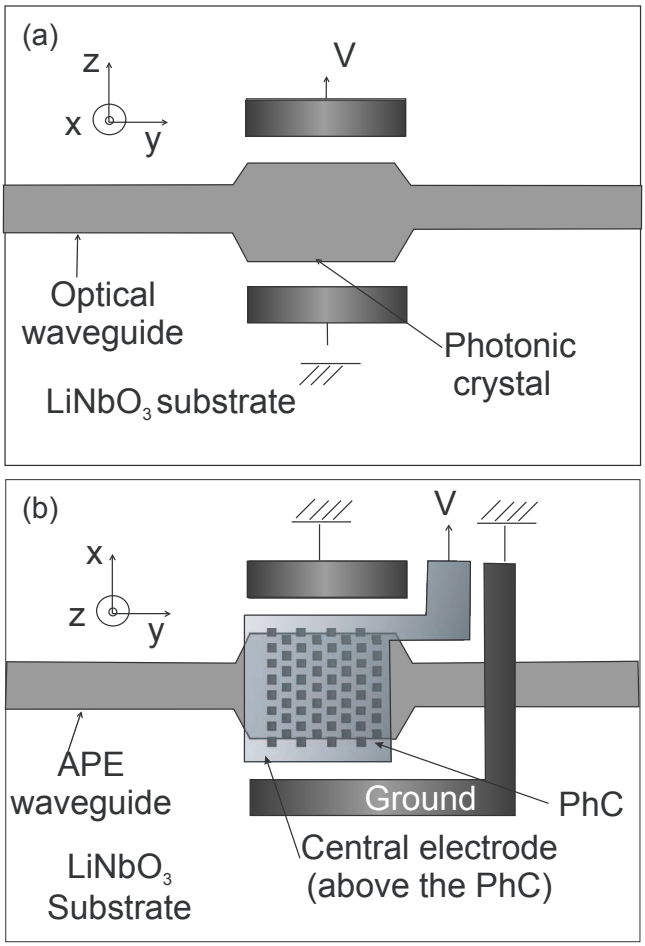


FIG. 1 Basic principle of $LiNbO_3$ electro-optic modulators. (a) X-cut modulator, (b) Z-cut modulator.

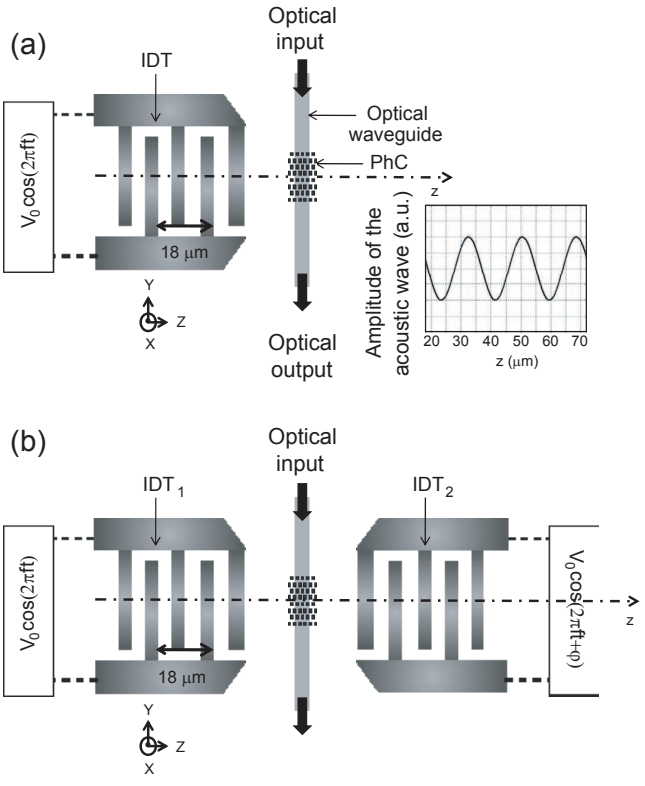


FIG. 2 Schematic of the acousto-optic modulators. (a) Basic principle. (b) Acousto-optic modulator with enhanced acousto-optic interaction.

same distance as the first one (see Figure 2(b)). The second IDT is similar to the first one, and stimulated by the same electric signal. Thus two SAWs are induced with identical amplitudes and frequencies, but with opposite directions of propagation. The interest of the configuration relies on the resulting stationary acoustic wave, which exhibits amplitude twice as large as the one obtained with a single IDT. The modulation amplitude of the output optical intensity depends on the phase between the two applied signals: it is maximal if the phase is equal to zero and minimal if the phase is equal to 90°.

The first step toward the fabrication of the modulators consists in determining theoretically the optimal geometric parameters of the PhCs. As previously mentioned, we target a simple photonic structure (without any line of defect) featuring a photonic gap. The TE polarization is imposed by the choice of the X-cut substrate and the fabrication process. The gradient index waveguides are indeed achieved by annealed proton exchange (APE), which increases only the extraordinary index of the substrate. We have focused on structures with low group velocity in view of enhancing the optical field in the PhC and increasing the interaction time. The aim is to compensate for the small length of the active section. A quantitative description of the influence of group velocity can be found in [14] for EO devices.

By plane wave expansion (PWE) calculation using the Bandsolve software of Rsoft®, we have determined that a good compromise can be reached between low group velocity, and low radiation losses if the PhC is made of a square array of holes with a ratio of $d/a = 0.5$ between the diameter d of the holes and the period a of the array. Indeed, the fourth band of the band diagram exhibits a flat band edge in the ΓX direction of propagation, as can be observed in Figure 3. The group velocity is deduced from the slope of the band and estimated to be $0,024c$, which is 21 times slower than the group velocity in a regular straight gradient index waveguide. The normalized frequency of the fourth band corresponds to $a/\lambda = 0,55$ where λ denotes the wavelength. So the period will be $a = 825$ nm if the operating wavelength is 1500 nm.

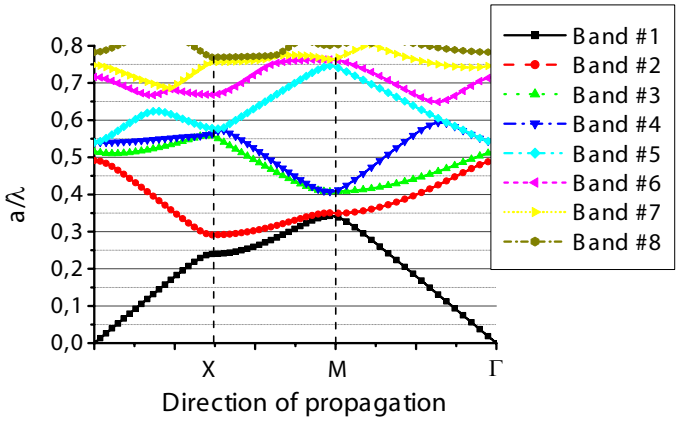


FIG. 3 Band diagram of a square array of holes with diameters of $d = 0,5a$ where a is the lattice period. The calculations were performed by PWE.

By using two-dimensional finite difference time domain (2D-FDTD) homemade calculations, we have determined that a minimal number of rows of 15 is required for obtaining an extinction ration better than −13 dB. Details about the FDTD-2D calculations are provided in [19]. The resulting transmission response is reported in Figure 4 with (black line) and without (gray line) an external stimulus. A shift of 7 nm is expected in the transmission spectrum if the refractive index is submitted to a variation of 0.01. In a regular straight optical waveguide, this refractive index variation would imply an unacceptable driving power, corresponding to an 863 V applied voltage for the EO devices or to an acoustic power of 2 W for the AO devices (see [14] and [15] for more details on the calculations of the driving powers). We are going to see in Section 4 that the required external driving power is significantly reduced owing to slow light effects in the PhC.

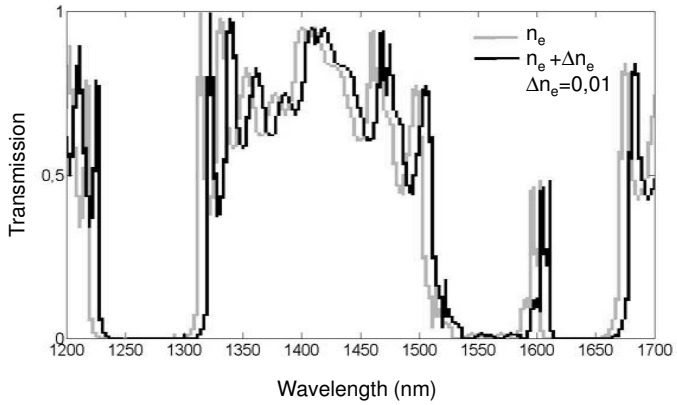


FIG. 4 Theoretical transmission response calculated by 2D-FDTD method for a 15 × 15 square array of holes with a period of 825 nm and a hole diameter of 412 nm. Gray line: transmission response through the PhC without external stimulus. Black line: expected transmission response for an induced variation of the refractive index of 0.01.

3 FABRICATION

The chips are fabricated on a 0.5 mm thick X-cut $LiNbO_3$ wafer. The optical gradient index waveguide is realized in a first step by annealed proton exchange (APE). This step is achieved through a SiO_2 mask in benzoic acid at 180°C for 1.5 hours. The process is followed by an annealing of the optical waveguide at 333°C for 9 hours. The parameters are chosen in order to make the optical core as close as possible to the surface while keeping an electro-optic coefficient of 30 pm/V at 1.55 μm wavelength. With such experimental parameters, the optical core is estimated to be at 1.4 μm from the surface, which can be compared to the 3 μm depth that would result from a standard Ti-diffusion process. The electrodes are sputtered onto the surface in a second step. Capacitive Ti electrodes are deposited with a thickness of 200 nm for EO devices, while Al IDTs are designed with a thickness of 200 nm for AO devices.

The key fabrication step is the etching of the PhCs. In what follows, we are going to show two methods that were developed for the fabrication of the $LiNbO_3$ PhCs.

3.1 Fabrication of lithium niobate photonic crystals by direct FIB milling

The first method relies on direct FIB patterning of the substrate. This method was firstly employed by S. Yin et al. to etch submicrometric 1D $LiNbO_3$ structures in 1999 [16]. In [17], we have extended the method to the fabrication of 2D PCs with depth of 2 μm. The method begins with the sputtering of a Cr layer with a thickness of 15 nm on to the substrate. The substrate is then introduced into the FIB chamber and exposed to a Ga^+ liquid metal ion source (LMIS) with ion acceleration energy of 30 keV. The pseudo-Gaussian shaped spot size is estimated to be 40 nm on the target. Multiple exposures are mandatory to avoid redeposition of the material in the neighborhood. Typically, the achievement of a hole with a width of 400 nm and a depth of 2 μm requires fifty loops. The dwell time is 0.5 ms, the step size is 11.4 nm and the total exposure time is typically 2 hours for a 15 $\times$ 15 array of holes. With this method, we have managed to obtain matrices with holes as small as 110 nm (see Figure 5(a)), and depth larger than 1 μm. A few realizations are shown in Figure 5. Figure 5(a) shows a triangular array of 5 $\times$ 5 holes with a depth of 1.5 μm and a diameter of 330 and 110 nm respectively. In Figure 5(b), we can see that depths of 2 μm can be reached when the period is of the order of 1 μm. The conical shape seen in the image is intrinsic to the method, and cannot be improved, unless by using additional gases that would help removing Nb from the etched substrate. In [14] and [18], some of the authors have demonstrated that photonic bandgap structures could be obtained with this method, despite the conical shape of the holes.

3.2 Fabrication of lithium niobate PhCs by FIB milling followed by RIE etching

A second method based on PE and RIE has been developed to reduce the fabrication time linked to the FIB process, and to fight against the conical shape of the holes. Indeed, the fabrication of 100 $\times$ 50 holes would require 44 hours of total FIB exposure, which is unacceptable. The first step of the second method consists in sputtering a 650 nm thick layer of polysilicon onto the substrate. The sample is then introduced into the FIB vacuum chamber. The parameters for etching are the same as previously described, but the dwell time is reduced to 0.2 ms, and the number of exposure is now of 30. A cross section of the polysilicon mask after FIB milling can be seen in Figure 6(a).

The method is followed by proton exchange (PE) in molten benzoic acid at 190°C. This step is essential to produce a significant lattice deformation which facilitates the etching step to come. Moreover, the replacement of Li^+ ions with H^+ ions helps preventing from LiF redeposition during the etching step, which plays a role in both the verticality of the substrate and the etch-rate. The pattern is then transferred to the substrate by CHF_3 RIE etching with a Plassys reactor. In order to enhance the chemical aspect of the RIE etching, we work with CHF_3 at pressures of 25-100 μbar, and RF power levels of 50-150 W.

The role of each parameter is detailed in [12]. After two hours of RIE at 100 W RF power and 60 μbar operated pressure, we have achieved matrices of holes with a diameter of 420 nm diameter and a depth of 1.2 μm (see Figure 6(b)). The side wall verticality is of the same order as that achieved by direct FIB patterning, but it should be improved by replacing the RIE step with an ICP-RIE step, which is currently under test. With such parameters, the total exposure time for a matrix of 100 $\times$ 50 holes is reduced to 10 hours for the FIB exposure, in addition to the 6.5 hours of proton exchange and 2 hours of RIE etching. Thus, the total duration of the process is 19 hours that can be advantageously compared with the 44 hours associated with direct FIB milling. This method is currently under test for the fabrication of photonic bandgap structures.

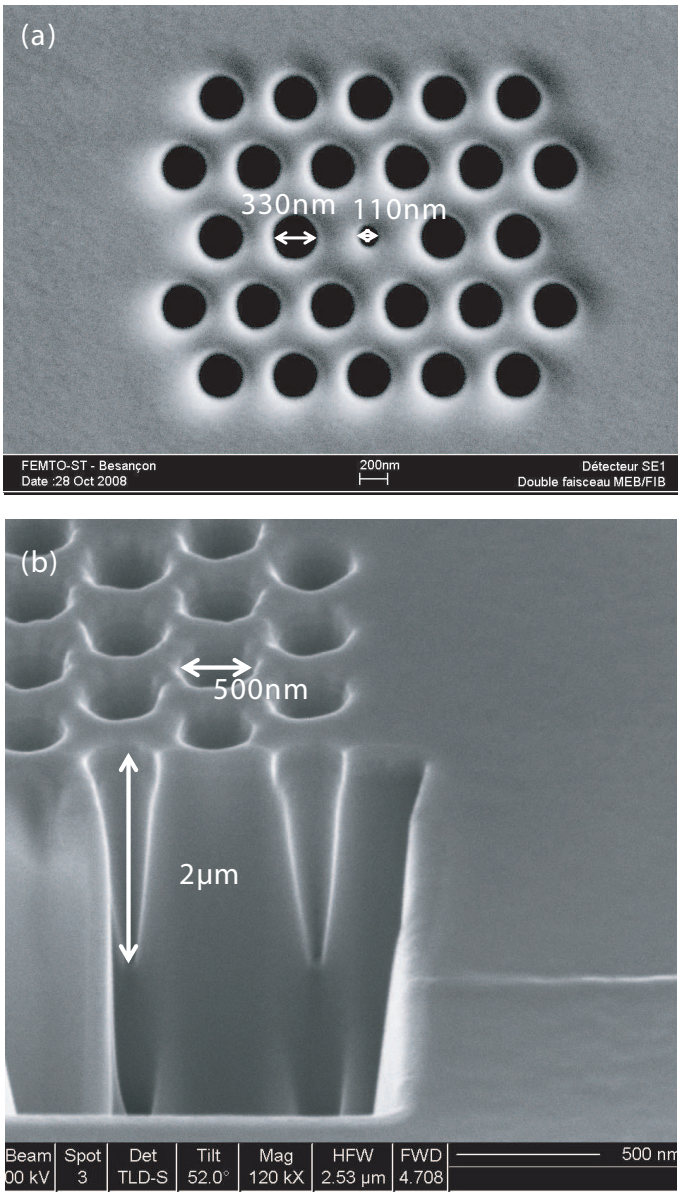


FIG. 5 SEM views of $LiNbO_3$ photonic crystals fabricated by FIB milling. (a) Triangular arrangement of 5 $\times$ 5 holes with a diameter of 130 nm and a center hole of 110 nm. (b) FIB cross section of a triangular arrangement of 4 $\times$ 4 holes with diameter of 500 nm, and depth of 2 μm, tilt = 52°.

Demonstrators of EO and AO micromodulators were fabricated by direct FIB milling. The detail of the characterization of EO modulators has been reported elsewhere [14]. Here we report the main associated results and detail how the actual performances of EO micromodulators can be improved. A sec-

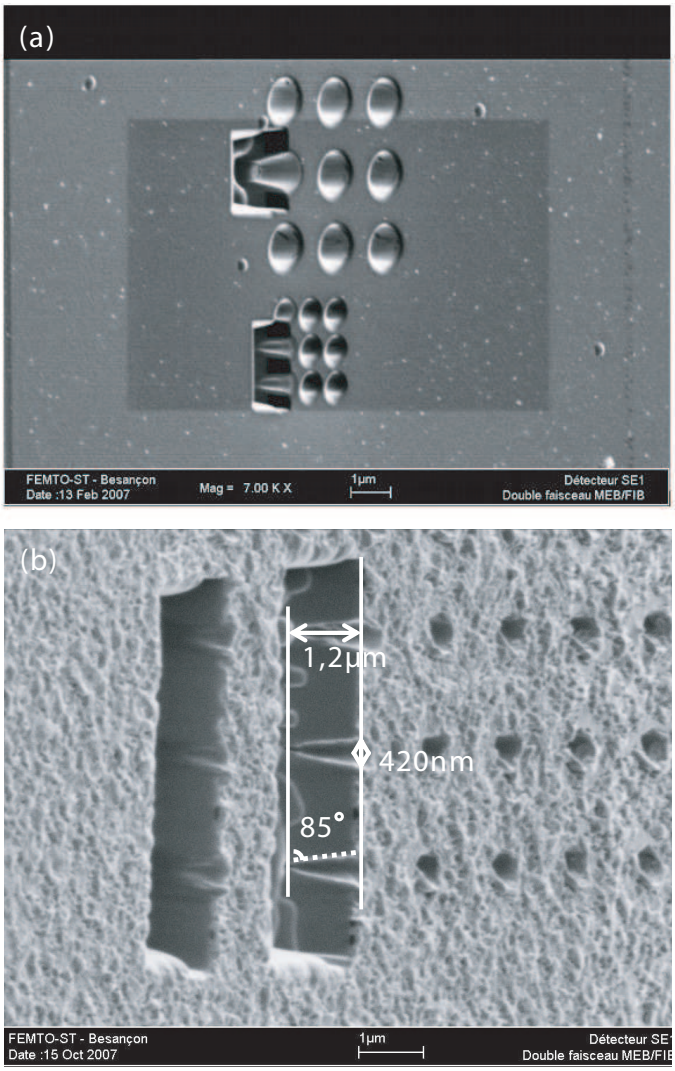


FIG. 6 SEM images of patterns, tilt = 50°. (a) Cross-view of the polysilicon mask after FIB milling. (b) Image of an X-cut substrate after etching of the Si mask layer, and 120 min of RIE etching. Pressure = 60 μbar - Power = 100 W - Resulting depth = 1.2 μm.

ond subpart is dedicated to the characterization of AO modulators.

4 CHARACTERIZATION OF THE MODULATORS

4.1 Electro-optical modulators

An overview of the electro-optical structures is given in Figure 7: the component is connected to a DC power supply via a printed circuit board (PCB) and wire bonding.

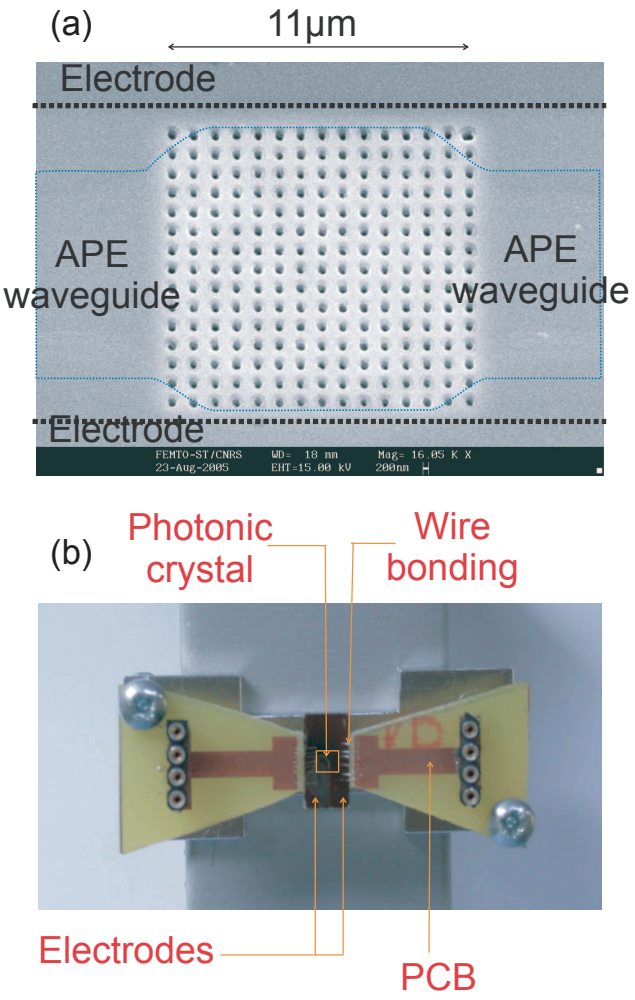


FIG. 7 Electro-optic photonic crystal modulators. (a) SEM view of the photonic crystal. (b) Picture of the connected PC modulator.

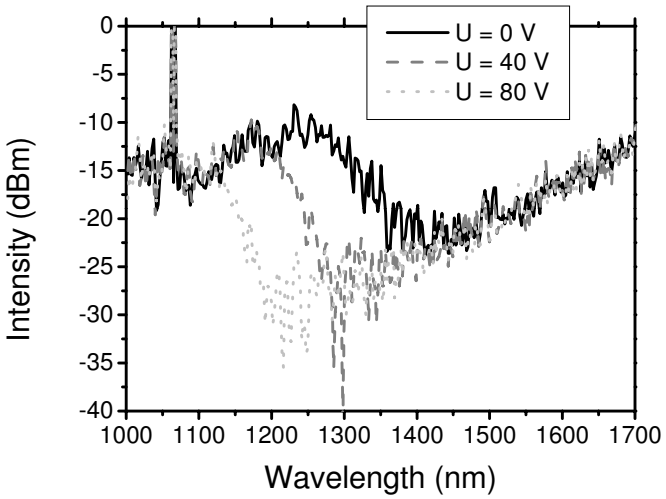


FIG. 8 Measured transmission of the photonic crystal for different applied external voltages (0, 40, and 80 V).

The resulting experimental large spectrum transmission is represented in Figure 8, while Figure 9 shows the figure of modulation at a wavelength of 1286 nm. These results demonstrate experimentally that an applied voltage induces a shift of 5 nm/V. The sign of the wavelength shift depends on the sign of the applied voltage, which shows that the modulation is due to an electro-optical effect, rather than to a thermo-optical effect. The driving voltage is measured to be 13.5 V, and the extinction ratio is of 5.2 dB (see Figure 9) at a wavelength of 1286 nm. These results confirm the significant role of low group velocity for reducing the driving power. Indeed, the calculations led to a shift of 7 nm for 863 V (that is 8 pm/V) for a regular optical waveguide. The experimental shift of 5 nm/V demonstrates that the employment of low group ve-

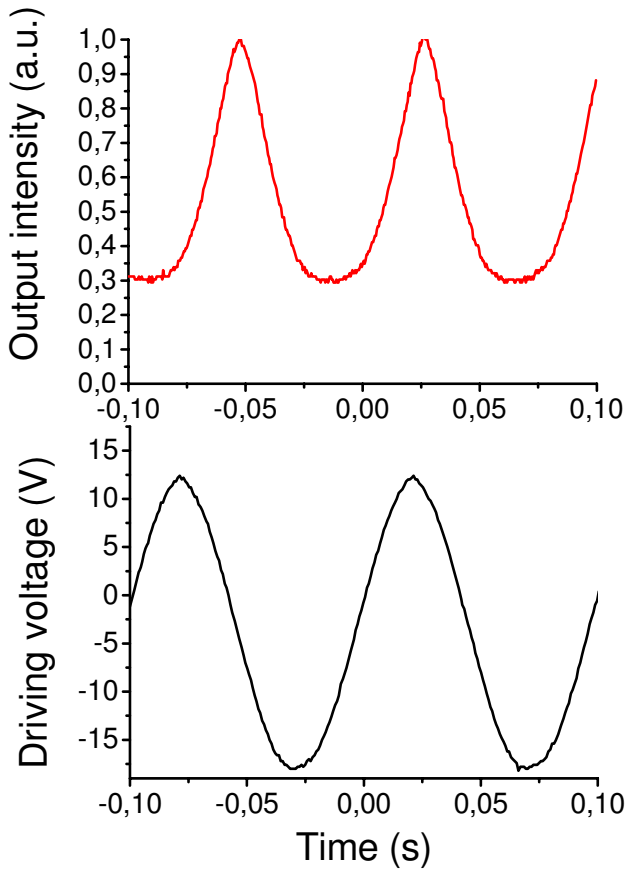


FIG. 9 Figure of modulation at 1286 nm for an optical input power of 1 mW. Top: optical response at the output of the modulator. The output intensity is represented relatively to the maximum output intensity. Bottom: driving voltage.

locity helps reducing more than 100 times the device driving voltage.

The measured bandwidth is 500 MHz, but it can be enlarged with an appropriate circuit. Indeed, the picture of Figure 7 clearly shows that the PCB circuit and the electrodes are not optimized for high bandwidth modulation and low driving voltage. More precisely, the use of a matched PCB with K connectors should help improving consequently the bandwidth. Further improvement of the bandwidth can be reached by reducing the capacity of the electrodes, which is measured to be $C_0 = 6.2$ pF. This capacity can be reduced to $C_1 = C_0 \cdot L_1/L_0$ if the length of the electrodes is reduced from $L_0 = 1$ cm to $L_1 = 11$ μm, which are respectively the actual length of the electrodes and the length of the PhC. With reduced electrodes, the bandwidth will be increased from $f_0 = 1/(2\pi R \cdot C_0)$ to $f_1 = f_0 \cdot L_1/L_0 = 450$ GHz. This limit can even be increased to THz by lowering the effective dielectric permittivity of the device with a ridge structure or a thin substrate.

The slope of the edge gap is one of the most important parameters that influence the driving voltage. The actual demonstrator exhibits a slope of 0.15 dB/nm in the transmission response, which means that a shift of 70 nm of the spectrum induces a variation of -10.5 dB of the transmission response at the operating wavelength of 1300 nm. Such experimental parameters should be dramatically improved by enhancing the slope of the edge gap. The 2D-FDTD calculations of the transmission response allow estimating that the maximum reachable slope with such a structure is 0.8 dB/nm. If this limit were reached, the driving voltage would be reduced by a factor of 5. We will see in Section 4.2 that an improvement of the aspect ratio of the holes enables a consequent improvement of the gap slope.

4.2 Acousto-optical modulators

An SEM image of the AO modulators can be visualized in Figure 10. The acoustic aperture of the IDTs is of 400 μm, and their configuration has been studied for reducing capacitive effects. They are wire bonded to a PCB which is itself connected to SMA wires via SMA connectors. The PCB is designed for ensuring impedance matching. The electric transmission (s_{21}) and reflection (s_{11}) through the IDTs were measured with a ZVRC vector network analyzer (Rhode & Schwarz). The results are reported in Figures 11(a) and (b) respectively. From these measurements, we can deduce that the resonance frequency is confirmed to be 191 MHz, and that the maximum of transmission through the connected IDTs is be -6.5 dB. The minimum of reflection corresponds to -32 dB. So 47% of the electric input power is converted into acoustic power at the frequency of resonance of the IDT.

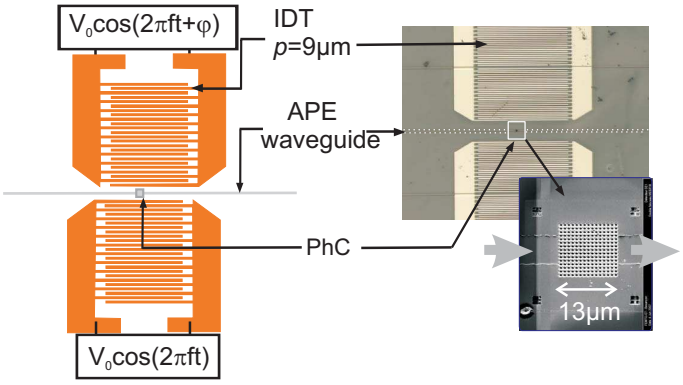


FIG. 10 Acousto-optical PhC modulators. Lefts: scheme of the device. Rights: photograph of the IDTs (20x), and SEM view of the photonic crystal surrounded by the IDTs.

The optical spectrum through the PhC was measured with a supercontinuum source as described in [14]. An extinction ratio of -30 dB is achieved (see Figure 12), which is due to an improvement of the nanostructuration since the fabrication of the EO modulators. The acousto-optic characterization was performed with a DFB laser diode emitting at 1400 nm wavelength. The laser light was injected into the optical waveguide on which was written the PhC. A high frequency generator (HF) was employed for generating a sinusoidal signal with a power of 13 dBm and a frequency of 191 MHz. The electric signal was divided in two signals by a delay line. Each of the two outputs of the delay line was connected to an IDT. Thus, the delay line enabled a control of the phase between the two signals applied on the IDTs. The maximum of modulation is achieved for a phase equal to zero between the two IDTs, and at the resonance frequency of the IDT. The two applied signals and the resulting modulation in these conditions are shown in Figures 13(a) and (b) respectively. It can be seen in Figure 13(a) that the delay line induces a slight difference between the two

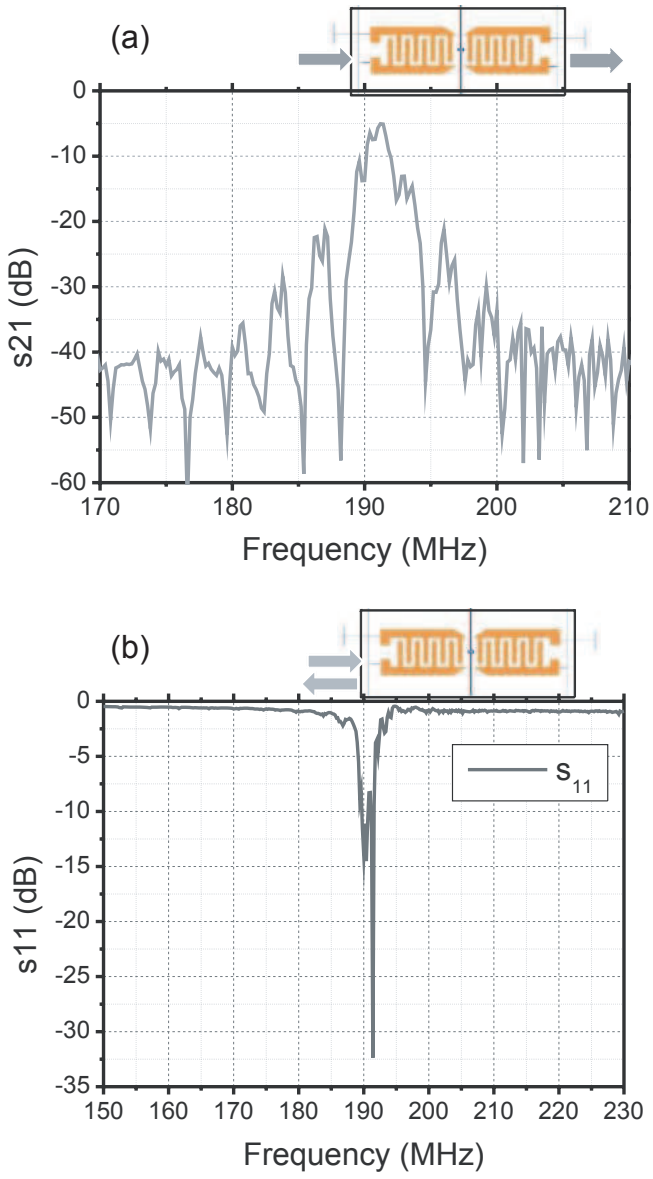


FIG. 11 Electrical characterization of the IDTs. (a) Transmission, (b) Reflection.

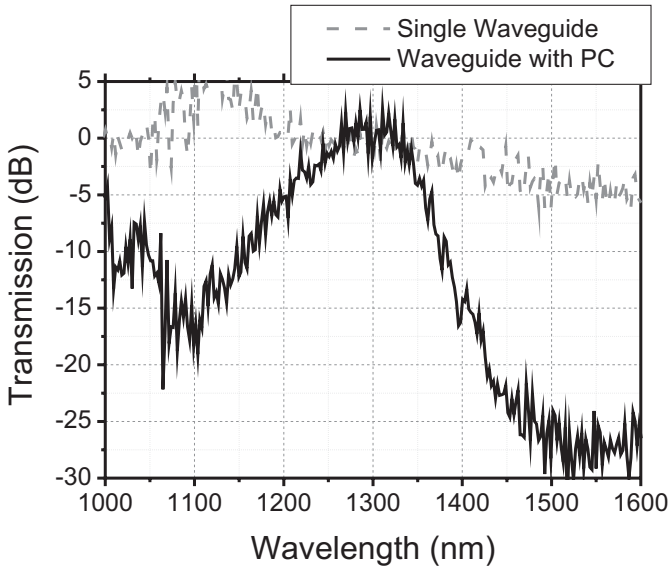


FIG. 12 Optical transmission through a single APE waveguide (dashed line), and through an APE waveguide realized in the same conditions, on which is written a square array of 15 × 15 holes (solid line) with a period of 826 nm and a diameter of 413 nm

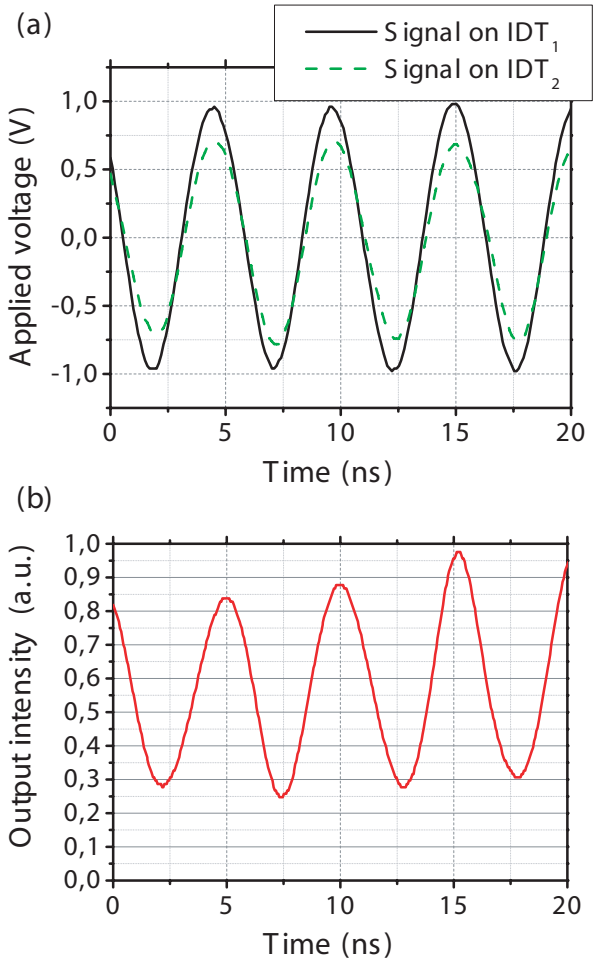


FIG. 13 Acousto-optic characterization of the micromodulators at 191 MHz frequency. (a) Electric signals applied on the IDTs. (b) Resulting intensity modulation at the output of the optical waveguide.

voltages applied on the IDTs. The extinction ratio is estimated to be −5.4 dB at 191 MHz for a driving power of 13 dBm (20 mW) (see Figure 12(b)). The corresponding acoustic power is evaluated to be 9 mW.

The amplitude of modulation is maximal at 191 MHz and decreases all the more than the operating frequency differs from the frequency of resonance of the IDT. If a thermo-optic effect or an electro-optic effect were responsible for the modulation, its amplitude would not depend on frequency. Consequently, these results demonstrate that the modulation is due to an acousto-optic effect.

5 CONCLUSION

We have demonstrated the feasibility of $LiNbO_3$ AO and EO micromodulators, and developed two methods for nanostructuring $LiNbO_3$ substrates. The two methods are well-suited for the fabrication of holes with diameter as small as 180 nm, for either X-cut or Z-cut substrates. Aspect ratios of 3:1 or more have been achieved with both methods. The first method, based on direct FIB patterning, is adequate for fields of photonic crystals smaller than 50 × 50 μm^2. The second method implies using the FIB as a lithographic tool that pat-

terns a polysilicon mask. In this case, subsequent steps of proton exchange and CHF_3 RIE are required. This method shows out to be interesting for structures exhibiting more than 500 holes. The methods enable the fabrication of new miniature modulators, with active length of only 11 μm. An EO modulator with a driving voltage of 13.5 V and an AO modulator with a driving power of 20 mW have been demonstrated. Further improvements can be reached by optimizing the capacitive electrodes of the EO modulator, and by achieving a better side wall verticality of the nanostructures. Appealing perspectives of fabricating miniature dynamic optical circuit can arise with these developments.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the Action Concertée Incitative "Nanosciences" COBIAN, No. NR137. The authors wish to acknowledge Blandine Guichardaz, Denis Bitschene, Jean-Yves Rauch and Roland Salut for technical assistance. Partial support through the ePIXnet European Network of Excellence is also acknowledged.

References

[1] L. Gu, W. Jiang, X. Chen, L. Wang, and R. T. Chen, "High speed silicon photonic crystal waveguide modulator for low voltage operation" Appl. Phys. Lett **90**, 071105 (2007).

[2] B. Schmidt, Q. Xu, J. Shakya, S. Manipatruni, and M. Lipson, "Compact electro-optic modulator on silicon-on-insulator substrates using cavities with ultrasmall modal volumes" Opt. Express **15**, 3140–3148 (2007).

[3] P. D. Batista, B. Drescher, W. Seidel, J. Rudolph, S. Jiao, and P. V. Santos, "Zn0/Si02 microcavity modulator on silicon" Appl. Phys. Lett. **92**, 133502 (2008).

[4] M. M. de Lima, Jr., R. Hey, and P. V. Santos, "Active photonic crystals based on surface acoustic waves" Appl. Phys. Lett. **83**, 2997–2999 (2003).

[5] V. Laude, M. Wilm, S. Benchabane, and A. Khelif, "Full bandgap for surface acoustic waves in a piezoelectric phononic crystal" Phys. Rev. E **71**, 036607 (2005).

[6] P. Ferraro and S. Grilli, "Modulating the thickness of the resist pattern for controlling size and depth of submicron reversed domain in lithium niobate" Appl. Phys. Lett. **89**, 133111 (2006).

[7] D.W. Ward, E.R. Statz, and K.A. Nelson, "Fabrication of polaritonic structures in $LiNbO_3$ and $LiTaO_3$ using femtosecond laser machining" Appl. Phys. A-Mater. **86**, 49–51 (2007).

[8] F. Laurell, Jonas Webjörn, G. Arvidsson, and J. Holmberg, "Wet etching of proton exchanged lithium niobate-a novel processing technique" J. Lightwave Technol. **10**, 1606–1610 (1992).

[9] T.-J. Wang, C.-F. Huang, W.S. Wang, and P.-K. Wei, "A novel wet-etching method using electric-field-assisted proton exchange in $LiNbO_3$" J. Lightwave Technol. **22**, 1764–1767 (2004).

[10] D.M. Gill, D. Jacobson, C.A. White, D.W. Jones, Y. Shi, W. J. Minford, and A. Harris, "Ridged $LiNbO_3$ modulators fabricated by a novel oxygen-ion implant/wet-etch technique" J. Lightwave Technol. **22**, 887–890 (2004).

[11] H. Hu, A.P. Milenin, R.B. Wehrspohn, H. Hermann, and W. Sohler, "Plasma etching of proton-exchanged lithium niobate" J. Vac. Sci A **24(A)**, 1012–1015 (2006).

[12] G. Ulliac, N. Courjal, H. M.H. Chong, and R.M. De La Rue, "Batch process for the fabrication of $LiNbO_3$ photonic crystals using proton exchange followed by CHF_3 reactive ion etching" to be published in Opt. Mater. R3591 (2009).

[13] Z. Ren, P.J. Heard, J.M. Marshall, P.A. Thomas, S. Yu, "Etching characteristics of $LiNbO_3$ in reaction ion etching and inductively coupled plasma" J. Appl. Phys. **103**, 034109 (2008).

[14] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, D. Van Labeke, F. I. Baida and R. Salut, "Electro-optic effect exaltation on lithium niobate photonic crystals due to slow photons" Appl. Phys. Lett. **89**, 241110 (2006).

[15] V. Laude, M. Wilm, and S. Ballandras, "Least action principle for the estimation of the slowness and the attenuation of pseudo surface acoustic waves" J. Appl. Phys. **93**, 10084 (2003).

[16] S. Yin, "Lithium niobate fibers and waveguides: fabrication and applications" Proc IEEE **87**, 1962–1974 (1999).

[17] F. Lacour, N. Courjal, M.P. Bernal, A. Sabac, C. Bainier, M. Spajer, "Nanostructuring lithium niobate substrates by focused ion beam milling" Opt. Mater. **27**, 1421–1425 (2005).

[18] M.-P. Bernal, N. Courjal, J. Amet, M. Roussey, C.H. Hou, "Lithium niobate photonic crystal waveguides: far field and near field characterization" Opt. Commun. **265**, 180–186 (2006).

[19] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, and F. I. Baida, "Experimental and theoretical characterization of a lithium niobate photonic crystal" Appl. Phys. Lett. **87**, 241101 (2005).

Analysis of a photonic crystal cavity based on absorbent layer for sensing applications

Jean Dahdah,* Nadège Courjal, and Fadi I. Baida

Institut FEMTO-ST, CNRS UMR 6174, Département d'Optique P.M. Duffieux, Université de Franche-Comté, 16 Route de Gray, 25030 Besançon Cedex, France
**Corresponding author: jdahdah@univ-fcomte.fr*

Received September 28, 2009; accepted December 2, 2009;
posted December 11, 2009 (Doc. ID 117631); published January 22, 2010

We present a photonic crystal (PhC) cavity based on a single hole defect filled with a sensitive absorbent layer for sensing applications. A preliminary study performed with the plane wave expansion method shows that the resonance peak of the cavity mode is 0.5 nm shifted for a 1 nm thickness variation of the sensitive layer. A Lorentz dispersion model implemented in a two-dimensional–finite difference time domain homemade code shows that the absorption of the layer can be exploited for enhancing the sensitivity of the sensor. With the proposed geometry, we find that a variation in the refractive index of 10^{-7} leads to a variation in the transmittivity of 23% at the resonance peak. This study is proposed for the development of a compact benzene sensor on a MgO doped lithium niobate PhC. © 2010 Optical Society of America

OCIS codes: 230.5298, 230.5750, 280.4788, 350.4238.

1. INTRODUCTION

Photonic crystals (PhCs) have been studied in the past years as attractive platforms for sensing applications [1–9]. Introducing a point defect in the otherwise perfect PhCs allows the electric field to be strongly confined around the defect region for a specific frequency. This leads to narrow transmission peaks inside the photonic bandgap. The high confinement of the optical mode in the small modal volume leads to a high quality factor [10,11] resulting in a high sensitivity of the microcavities toward local changes in their environment (temperature, pressure, refractive index, etc.). In the last decade, many studies have demonstrated, both experimentally and theoretically, the attractive potential of microcavities for detecting the presence of specific molecules. These sensors rely on a microcavity coated with a functional layer that reacts specifically with a given analyte. The physicochemical reaction induces a change in the refractive index [1,8] together with a variation in the layer's thickness, which causes a frequency shift of the resonance peak [2,5].

In this paper, we present a single hole defect (SHD) microcavity functionalized by a sensitive layer having an absorption peak at the resonance wavelength. The presence of the analyte is thus detected by a variation in the output intensity that is not only due to the variations in thickness and refractive index, but also to the modification of absorption. We are going to show that this configuration helps in increasing the sensitivity of the sensor.

The theoretical study of the microcavities coated by a thin sensitive layer can be performed by the finite difference time domain (FDTD) method, but the calculation is highly time consuming due to the small thickness of the layer. Here, we propose a preliminary approach based on plane wave expansion (PWE) associated with the supercell method, which enables a significant gain of time calculation for establishing the optimal parameters of the cavity. A 2D-FDTD homemade code [12] is exploited only in a second time, in order to take into account the absorption of the sensitive layer and to evaluate its contribution to the sensor's sensitivity.

2. SHD CAVITY DESIGN

The proposed structure is schematically depicted in Fig. 1(a). It consists of a biperiodic triangular lattice of circular air holes, in which a defect is introduced by reducing the center pore radius. A third medium is introduced as a ring-shaped intermediate layer around all the holes' surfaces. This medium corresponds to a sensitive layer that can react selectively with a specific analyte. The reaction induces a change in the properties of the layer (refractive index, absorption, and thickness) that can be measured by a variation in the light intensity transmitted at the cavity mode resonance frequency. In view of enhancing the intensity variation, the parameters of the cavity are determined to make the resonance peak of the cavity coincide with the absorption peak of the sensitive layer.

Here we propose to study a MgO:LiNbO3 substrate coated with a porphyrin layer. The choice of the lithium niobate substrate is motivated by the possibility of tuning the transmission response by an external effect. A dynamic control of the operating point can for instance be provided by an electro-optic effect. Consequently, the resonance peak of the cavity can be adjusted electrically to correspond to the maximum of absorption of the porphyrin layer, which occurs at $\lambda = 419.5$ nm. The LiNbO3 substrate is doped with MgO to avoid the optical damages due to the photorefractive effect at visible wavelengths [13]. The possibility of functionalizing lithium niobate substrates has recently been demonstrated in [14]: the same method can be applied for grafting porphyrin layers

 © 2010 Optical Society of America

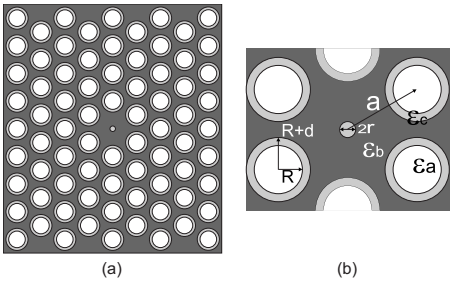


Fig. 1. (a) SHD studied cavity, where dark gray corresponds to substrate (ϵ_b=5.319), light gray indicates the sensitive layer (ϵ_c=2.775), and white areas are air holes (ϵ_a=1). (b) Zoom-in made around the defect region where r is the defect radius, d is the thickness of the layer, R is the air hole radius, and a is the period of the PhC.

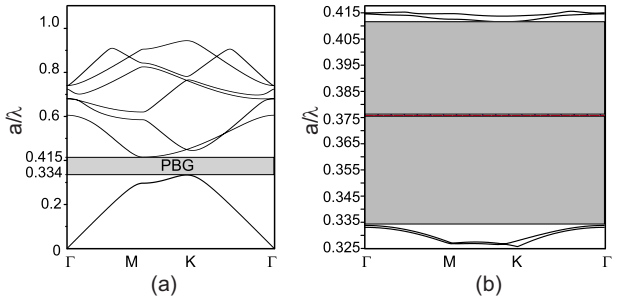


Fig. 2. (Color online) (a) Dispersion diagram of a triangular lattice without a defect, where a photonic bandgap gives rise between $\omega a/2\pi c$=0.334 and $\omega a/2\pi c$=0.415. (b) Zoom-in on the photonic bandgap of the cavity where the resonant mode of the SHD cavity appears at $\omega a/2\pi c$=0.3761.

on lithium niobate substrates. The porphyrin layer plays then the role of a probe for benzene molecules.

The dielectric permittivity of the MgO:LiNbO3 substrate is ε_b=5.3190 at $\lambda \simeq 420$ nm. The dielectric permittivity of the porphyrin layer is ε_c=2.7225, and its thickness is denoted as d as shown in Fig. 1(b). Its absorption properties are described in the third section.

This choice of benzene sensor was motivated by numerous reports that denounce its high concentrations in habitations and the consequent impacts on health. Indeed, benzene is myelo-toxic and it is a leukemia-inducing compound. So, a compact sensor can be very attractive for evaluating personal exposures to benzene pollutants. It should be emphasized that the presented configuration is not limited to one application. For instance, the porphyrin layer could be replaced by a metallophthalocyanine layer if volatile organic compound vapors were targeted. In this case, the operating wavelength would be 600 nm [15].

First, we have developed a PWE based code which takes into account the presence of a thin layer coating the holes. The first step was to determine the band structure of the 2D triangular lattice PhC. The band structure is determined by the Fourier coefficients of the reciprocal dielectric functions [16], which in our case are given by

$$\kappa(0) = f_1\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_c}\right) + f_2\left(\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) + \frac{1}{\varepsilon_b}, \quad (1)$$

$$\kappa(G) = 2f_1\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_c}\right)\left(\frac{J_1(GR)}{GR}\right) + 2f_2\left(\frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) \times \left(\frac{J_1(G(R+d))}{G(R+d)}\right), \quad (2)$$

where $f_1=(2\pi/\sqrt{3})(R^2/a^2)$, $f_2=(2\pi/\sqrt{3})[(R+d)^2/a^2]$ are the filling factors, $J_1(x)$ is the Bessel function of the first kind, and G is the reciprocal lattice vector in two dimensions. The band structure shown in Fig. 2(a) corresponds to a triangular lattice of air holes coated with a thin layer ($0.1a$) of porphyrin for the TE polarization meaning that the magnetic field **H** is parallel to the hole axis. The TE polarization is chosen because there is no photonic bandgap for the TM one.

To model the SHD cavity we have developed a code based on the supercell method that takes into account the defect center inside the hexagonal matrix of holes and the porphyrin layer around the holes. The supercell unit is defined by 9×9 holes, which is the minimum superlattice size that avoids splitting of resonances. All parameters of the SHD simulations are defined relative to the period a of the lattice. By studying the influence of the radius R of the lattice holes, the thickness d of the sensitive layer, and the radius r of the defect hole, we have determined a configuration that enables a resonant mode at the center of the bandgap while meeting the technological requirements of fabrication. This compromise was found with the configuration $d=0.1a$, $R=0.3a$, and $r=0.1a$. With such a configuration, the defect hole is totally filled by the porphyrin layer.

Figure 2(b) shows the resonant mode for the SHD cavity for TE polarization. As can be seen in the figure, the configuration leads to a normalized resonance frequency of $\omega a/(2\pi c)$=0.3761, which implies a lattice period a =158 nm for the operating wavelength λ=419.5 nm.

The sensitivity of the structure to changes in the thickness of the porphyrin was evaluated by the PWE method combined with the supercell method as described above. The results can be seen in Fig. 3 and they show that the resonance shift increases with the thickness of the sensitive layer. More precisely, we can conclude from Fig. 3 that a variation in thickness of $0.04a$ leads to a shift in the resonance frequency of $16.10^{-3}(c/a)$, which means that a variation in thickness of 1 nm of the sensitive layer

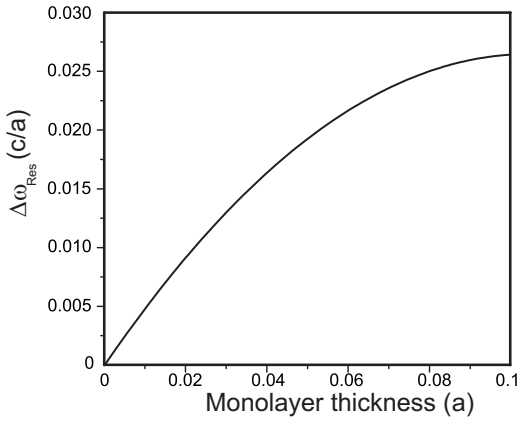


Fig. 3. Plot of resonance shift as function of monolayer optical thickness.

implies a shift of 0.5 nm of the resonance peak at the operating wavelength of 419.5 nm.

Though difficult to realize, such a device is nevertheless compatible with the actual machining techniques. Until now, the best reported performances on lithium niobate nanostructuration have been achieved by focused ion beam (FIB) milling. The Carz Zeiss XB1540 FIB system or FEI's newest dual beam TM (Helios Nanolab family) exhibit a resolution of 5 nm at 30 keV. These new techniques enable us to be confident about the realization of holes with a diameter of 32 nm (radius of 16 nm). Moreover, the scaling of PhC features for sensitive layers having an absorption peak >420 nm is also possible.

These preliminary results show the interest of the PWE method for estimating the optimal parameters of the cavity coated with a thin sensitive layer. They also emphasize a sensitivity that can advantageously be compared to what can be reported with other configurations (see [5] for example). However, a wavelength shift lower than 1 nm is very difficult to detect: we propose to exploit the absorption of the layer in view of enhancing the variation in the transmission response in the presence of benzene. These further developments have been investigated by the 2D-FDTD method.

3. ANALYSIS OF THE PORPHYRIN MONOLAYER

As previously explained, the aim is to make the resonance peak of the PhC microcavity coincide with the absorption peak of the porphyrin layer. The purpose is to exploit both the maximum variation of the imaginary part of the dielectric constant and the maximum variation of the refraction index, as can be deduced from the Kramers–Kronig relations.

In view of evaluating the influence of the layer's absorption on the transmission response, we propose to fit the permittivity ε_L of the porphyrin's layer with a Lorentz dispersion model that will be implemented in a FDTD code [17]. More precisely, the analytical expression of dielectric permittivity ε_L is modeled as

$$\varepsilon_L(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\Delta\varepsilon\Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2) + \imath\Gamma_L\omega}, \tag{3}$$

where Ω_L is the oscillator strength, Γ_L is the spectral width of the Lorentz oscillators, $\Delta\varepsilon$ is the weighting factor [18], and finally $\varepsilon_\infty = n_0^2$ where $n_0 = 1.65$ denotes the refractive index of the layer far from the resonance. The refractive index n and the extinction coefficient κ are deduced from the real and the imaginary parts of $\sqrt{\varepsilon_L}$, respectively:

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\varepsilon_\infty + \sqrt{\varepsilon_\infty^2 + \frac{\Delta\varepsilon^2\Omega_c^2}{\Gamma_L^2}}\right)}, \tag{4}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2}\left(-\varepsilon_\infty + \sqrt{\varepsilon_\infty^2 + \frac{\Delta\varepsilon^2\Omega_c^2}{\Gamma_L^2}}\right)}. \tag{5}$$

The extinction coefficient κ can be evaluated from the experimental measurement of absorbance as described in [19]. The resulting experimental curve is reported with a solid line in Fig. 4(a). This experimental curve was fitted to the Lorentz dispersion model expressed in Eq. (5) by a least-squares method. The fitting parameters are presented in Table 1, and the resulting fitting curve is represented with a dashed line in Fig. 4(a).

The frequency dependence of the refractive index was then deduced from the Lorentz model expressed in Eq. (4) and from the fitting parameters reported in Table 1. The resulting figure of dispersion is reported in Fig. 4(b) showing a maximum index variation of only 10^{-5}.

The adsorption of gas molecules by the porphyrin layer provokes a change in the layer's absorption peak. This variation can be modeled by a variation in the weighting factor $\Delta\varepsilon$. The relationship between the weighting factor $\Delta\varepsilon$ and the concentration of gas molecules has been estimated from [19] and experimental results that were performed in our laboratory. In the absence of benzene, the weighting factor is estimated to be $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-6}$ while it becomes $\Delta\varepsilon = 7.7\times10^{-5}$ in the presence of 45 ppm of benzene. Thus, a concentration of benzene of 5 ppm corresponds to a weighting factor of $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-6}$, and it becomes $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-5}$ in the presence of 50 ppm of benzene.

The variation in the weighting factor is reverberated on both the extinction coefficient and the refractive index, as can be seen in Eqs. (4) and (5). We have represented the influence of the weighting factor on the refractive index and on the extinction coefficient in Figs. 9(a) and 9(b), respectively. The refractive index and the extinction coefficient were evaluated at the maximum of absorption of the

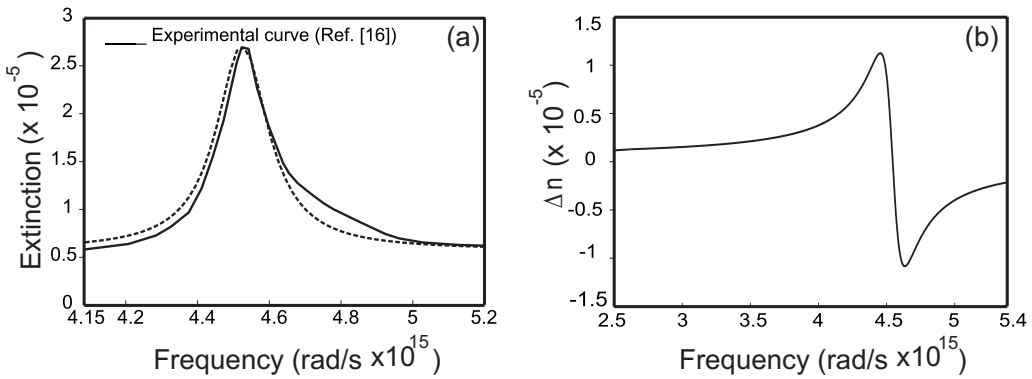


Fig. 4. (a) Spectral variation of the extinction coefficient of the porphyrin layer; the solid line corresponds to the experimental data and the dashed line corresponds to the Lorentzian fitting. (b) Refraction index variation of the porphyrin layer.

Table 1. Parameters for the Lorentz Dispersion Model Described in Eq. (3)

Dispersion Model	Resonance Frequency	FWHM	Weighting Factor
Lorentz model	$\Omega_L = 4.534 \times 10^{15}$ rad/s	$\Gamma_L = 2 \times 10^{14}$ rad/s	$\Delta\varepsilon = 0.086 \times 10^{-4}$

porphyrin layer. We can conclude from Figs. 9(a) and 9(b) that the weighting factor $\Delta\varepsilon$ influences more the extinction coefficient than the refractive index. Indeed, a weighting factor of $\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-5}$ induces a variation in the refractive index of only 10^{-7}, which can be compared to the 6×10^{-4} variation in the extinction coefficient. This behavior was implemented in a 2D-FDTD code in order to evaluate the changes in the transmission response in the presence of benzene molecules.

4. FDTD SIMULATIONS AND ABSORPTION EFFECT

2D-FDTD calculations based on a homemade code were performed to analyze the resonant mode. Indeed, 2D-FDTD calculations provide an estimation of the peak behavior provided that the holes are deep enough [20] (typically deeper than six times the diameter). The SHD cavity structure data were generated using MATLAB, and the defect hole position was then integrated to define the complete PhC structure [Fig. 1(a)]. The PhC structure was modeled with an incident beam which consists of a Gaussian pulse centered at $\lambda = 419.5$ nm and having a temporal width allowing the calculation of transmission over a wide spectral range. In order to faithfully describe both the holes and the porphyrin monolayer, we used a subgridding technique [21]. By the way, one period of the PhC is initially discretized with $(20 \times 82) \times (20 \times 41)$ nodes. Then, an average value of the permittivity is calculated over 20×20 nodes in order to get 82×41 nodes for one period in the FDTD calculations. Simulations were made for the TE polarization and for the ΓM direction. The different transmission spectra of the cavity were calculated for wavelengths ranging from 350 to 550 nm. Figure 5(b) presents the transmission spectrum of the configuration shown in Fig. 5(a): the resonance peak appears at $\lambda = 419.5$ nm in the photonic bandgap, with a quality factor of Q around 700. Such a quality factor is not so adequate for the refractive index sensor [22], but in our case, we studied the influence of the layer's absorption on the transmittivity of the PhC and not the mode shift.

In Fig. 6 we present the influence of the mode cavity resonance versus $\Delta\varepsilon$. Both the amplitude and the position

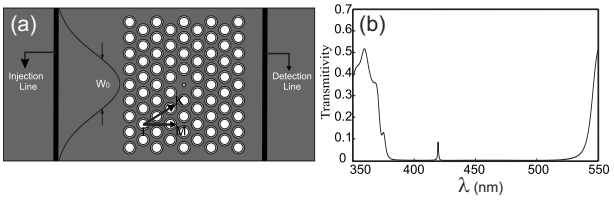


Fig. 5. (a) Scheme of the photonic structure simulated by FDTD where the light propagates in the ΓM direction. The incident Gaussian beam has a beam waist $W_0 = 2$ μm. (b) Transmission spectrum of the PhC cavity, where the resonant mode appears in the photonic bandgap at $\lambda \simeq 419.5$ nm.

of the transmission peak are affected. The transmittivity at the resonance peak is plotted as a function of the wavelength peak λ_r in Fig. 7(a) and as a function of $\Delta\varepsilon$ in Fig. 7(b). In addition, we have determined the electromagnetic field distribution using our FDTD code (Fig. 8) without and with the absorption phenomenon. Figures 8(a) and 8(d) show the square root of the magnetic field amplitude for $\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-6}$ (i.e., without benzene) and for $\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-3}$ (i.e., in the presence of 5000 ppm of benzene), respectively. As it is shown, the magnetic field is strongly confined around the defect. Figures 8(b) and 8(c) and Figs. 8(e) and 8(f) present, respectively, the square root of the electric field's amplitude for the same cases as described above. As it is well shown on these last figures, the electric field is confined in the defect region where the defect hole was totally filled by the porphyrin layer. Note that the confinement of intensity inside the cavity is almost 60 times smaller when the weighting factor is increased 1000 times. Though not realistic ($\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-3}$ corresponds to 5000 ppm of benzene), the use of such values helps emphasize the influence of absorption upon the intensity distribution.

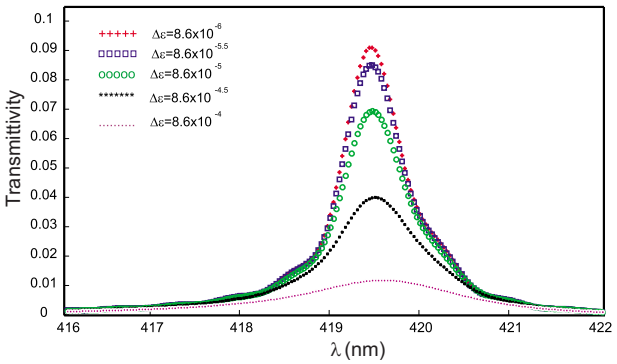


Fig. 6. (Color online) Variation in the transmittivity at the cavity mode for different values of $\Delta\varepsilon$.

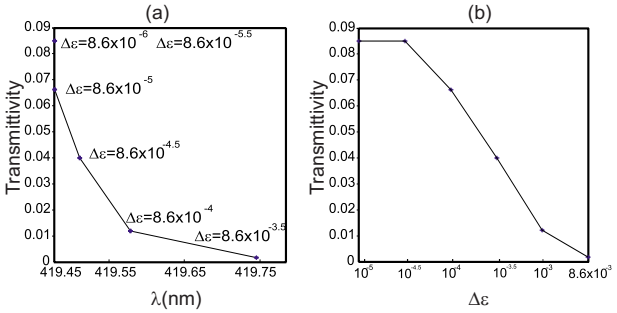


Fig. 7. (Color online) (a) and (b) present, respectively, the square root of the amplitude of the magnetic and electric fields, without considering the absorption effect. (d) and (e) present those for $\Delta\varepsilon = 8.6 \times 10^{-3}$ (corresponding to 5000 ppm of benzene). [(c), (f)] Zoom-in at the defect region in the case of the electric field distribution.

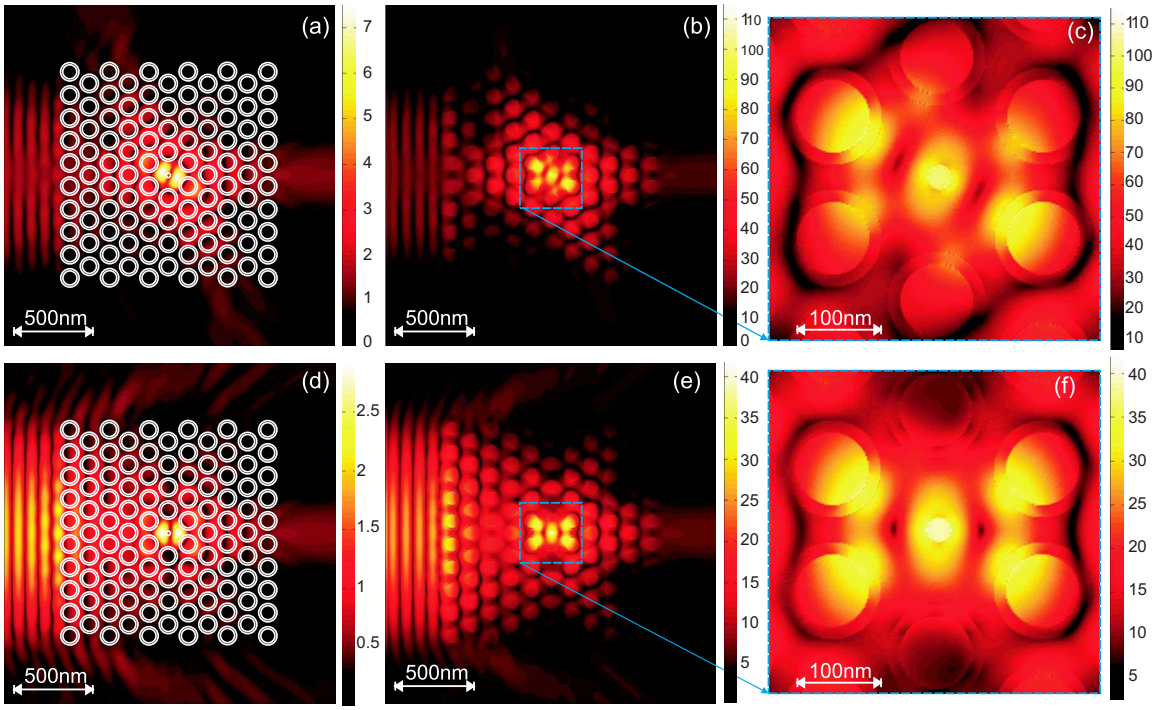


Fig. 8. (Color online) (a) Transmittivity as a function of the resonance wavelength, where a slight red shift is obtained by decreasing $\Delta\varepsilon$. (b) Transmittivity through the cavity as a function of $\Delta\varepsilon$. $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-6}$ corresponds to the porphyrin layer without benzene. $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-5}$ corresponds to a presence of 50 ppm of benzene and $\Delta\varepsilon = 8.6\times10^{-4}$ to a presence of 500 ppm of benzene.

From these results, we can conclude that the resonance peak encounters a variation in transmittivity of 23% when the weighting factor varies from 8.6×10^{-6} (i.e., without benzene) to 8.6×10^{-5} (i.e., in the presence of 50 ppm of benzene), which corresponds to a variation in the refractive index of 10^{-7} [see Fig. 9(a)] and a variation of 6×10^{-4} for the extinction coefficient [see Fig. 9(a)]. Consequently, the sensitivity of the device is estimated to be of about 3 ppm. Indeed, by considering that the minimum detectable variation in transmittivity is of 1%, we have calculated that 2.3 ppm is the minimum concentration of benzene that can be detected. This value is strongly dependent on the performances of the sensitive layer: improving its sensitivity would enable detection of lower quantities of benzene.

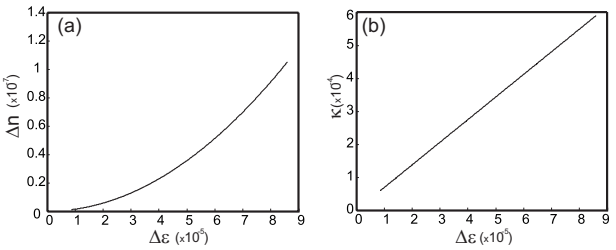


Fig. 9. (a) Refraction index and (b) extinction coefficient variation function of the weighting factor $\Delta\varepsilon$ calculated from Eqs. (4) and (5), respectively.

5. CONCLUSION

We have presented a PhC with a single-hole defect (SHD) functionalized by a sensitive absorbent layer for sensing applications. The advantage of this configuration relies on an enhanced sensitivity that is not only due to a variation in the thickness and refractive index, but also to the variation in absorption in the presence of the targeted molecules.

We have implemented a supercell method that takes into account the thin sensitive layer. First, the resonance peak has been estimated to encounter a shift of 0.5 nm per 1 nm variation in the layer's thickness. Second, we have studied the behavior of the cavity by using 2D-FDTD simulations that includes a Lorentz dispersion model to take into account the layer's absorption. The sensitivity of the sensor is considerably enhanced by working at the peak of absorption of the sensitive layer. The variation in transmittivity at the resonance peak was estimated to be of 23% for an index variation of only 10^{-7}. This study was dedicated to the detection of benzene, but it can be applied to the realization of new compact dynamic sensors for biomedical or environmental applications.

ACKNOWLEDGMENTS

We deeply thank F. Chérioux for useful discussions and his precious help concerning the chemical part of this project. We also acknowledge the Conseil Régional de Franche-Comté for financial support under Grant No. 74SB.

REFERENCES

1. T. Sünner, T. Stichel, S.-H. Kwon, T. W. Schlereth, S. Hofling, M. Kamp, and A. Forchel, "Photonic crystal cavity based gas sensor," Appl. Phys. Lett. **92**, 261112 (2008).
2. M. R. Lee and P. M. Fauchet, "Two-dimensional silicon photonic crystal based biosensing platform for protein detection," Opt. Express **15**, 4530–4535 (2007).

3. T. Stomeo, M. Grande, A. Qualtieri, A. Passaseo, A. Salhi, M. De Vittorio, D. Biallo, A. D'orazio, M. De Sario, V. Marrocco, V. Petruzzelli, and F. Prudenzano, "Fabrication of force sensors based on two-dimensional photonic crystal technology," Microelectron. Eng. **84**, 1450–1453 (2007).
4. T. Prasad, D. M. Mittleman, and V. L. Colvin, "A photonic crystal sensor based on the superprism effect," Opt. Mater. **29**, 56–59 (2006).
5. C. Kang and S. M. Weiss, "Photonic crystal with multiple-hole defect for sensor applications," Opt. Express **16**, 18188–18193 (2008).
6. S.-H. Kwon, T. Sünner, M. Kamp, and A. Forchel, "Optimization of photonic crystal cavity for chemical sensing," Opt. Express **16**, 11709–11717 (2008).
7. T. M. Geppert, S. L. Schweizer, J. Schilling, C. Jamois, A. V. Rhein, D. Pergande, R. Glatthaar, P. Hahn, A. Feisst, A. Lambrecht, and R. B. Wehrspohn, "Photonic crystal gas sensors," Proc. SPIE **5511**, 61–70 (2004).
8. E. Chow, A. Grot, L. W. Mirkarimi, M. Sigalas, and G. Girolami, "Ultracompact biochemical sensor built with two-dimensional photonic crystal microcavity," Opt. Lett. **29**, 1093–1095 (2004).
9. S. Chakravarty, Y. Kang, J. Topolancik, P. Bhattacharya, M. E. Meyerhoff, and S. Chakrabarti, "Photonic crystal microcavity source-based chemical sensor," Proc. SPIE **6005**, 600504 (2005).
10. Y. Akahane, T. Asano, B.-S. Song, and S. Noda, "High-*Q* photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal," Nature **425**, 944–947 (2003).
11. K. Srinivasan and O. Painter, "Momentum space design of high-*Q* photonic crystal optical cavities," Opt. Express **10**, 670–684 (2002).
12. F. Baida, D. Van Labeke, Y. Pagani, B. Guizal, and M. Al Naboulsi, "Waveguiding through a two-dimensional metallic photonic crystal," J. Microsc. **213**, 144–148 (2004).
13. D. A. Bryan, R. Gerson, and H. E. Tomaschke, "Increased optical damage resistance in lithium niobate," Appl. Phys. Lett. **44**, 847–849 (1984).
14. J. Bennes, F. Cherioux, and S. Alzuaga, "Droplet ejector using surface acoustic waves," in *Proceedings of IEEE Ultrasonics Symposium* (IEEE, 2005), pp. 823–826.
15. R. Rella, J. Spadavecchia, G. Ciccarella, P. Siciliano, G. Vasapollo, and L. Valli, "Optochemical vapour detection using spin coated thin films of metal substituted phtalocyanines," Sens. Actuators B **89**, 86–91 (2003).
16. K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals* (Springer-Verlag, 2001).
17. A. Taflove, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain* (Artech House, 2005).
18. A. Vial, A.-S. Grimault, D. Macías, D. Barchiesi, and M.-L. de la Chapelle, "Improved analytical fit of gold dispersion: application to the modeling of extinction spectra with a finite-difference time-domain method," Phys. Rev. B **71**, 085416 (2005).
19. I. Leray, M.-C. Vernières, and C. Bied-Charreton, "Porphyrins as probe molecules in the detection of gaseous pollutants: detection of benzene using cationic porphyrins in polymer films," Sens. Actuators B Chem. **54**, 243–251 (1999).
20. G. Burr, S. Diziain, and M.-P. Bernal, "The impact of finite-depth cylindrical and conical holes in lithium niobate photonic crystals," Opt. Express **16**, 6302–6316 (2008).
21. M. Roussey, F. I. Baida, and M.-P. Bernal, "Experimental and theoretical observations of the slow-light effect on a tunable photonic crystal," J. Opt. Soc. Am. B **24**, 1416–1422 (2007).
22. I. M. White and X. Fan, "On the performance quantification of resonant refractive index sensors," Opt. Express **16**, 1020–1028 (2008).

Acousto-optically tunable lithium niobate photonic crystal

Nadège Courjal,[a] Sarah Benchabane, Jean Dahdah, Gwenn Ulliac, Yannick Gruson, and Vincent Laude
Institut FEMTO-ST, Université de Franche-Comté, CNRS, 32 Avenue de l'Observatoire, F-25044 Besançon Cedex, France

(Received 5 December 2009; accepted 2 March 2010; published online 29 March 2010)

We report on an active two-dimensional lithium niobate photonic crystal (PhC) driven by stationary Rayleigh surface acoustic waves. The configuration relies on two interdigital transducers that modulate the refractive index through the acousto-optical effect. Highly efficient, compact acousto-optical PhCs with an active length of only 13 μm and a driving electrical power of 20 mW have been fabricated and characterized. Experiments show that an enhancement factor of the elasto-optical interaction of the order of 61 is obtained thanks to slow light effects in the PhC. © *2010 American Institute of Physics*. [doi:10.1063/1.3374886]

Photonic crystals offer a unique means of controlling light propagation at the wavelength scale. Their intrinsic capability to tailor the dispersion properties of light positions them as very powerful tools for the implementation of complex integrated optical functionalities. If the focus has initially been set on the realization of passive devices, the possibility to fabricate these photonic crystals (PhCs) on materials that are strongly sensitive to external stimuli has opened the way toward the development of tunable optical components. Different approaches have already been reported, relying on the use of electro-optical,[1,2] magneto-optical,[3] carrier injection,[4] or thermo-optical[5] modulation. Another versatile way to control the refractive index profile of the propagation medium is to make use of elastic waves. Acousto-optical devices have been widely used in their bulk configuration for instance for acousto-optical tunable filtering of laser sources or for pulse shaping in ultrashort lasers.[6] In integrated optics, most of the reported solutions rely on the use of surface acoustic waves (SAW) that can be easily generated atop a piezoelectric surface.[7] Their use however remains to date limited by their relatively low efficiency. There is hence a need for integrated device geometries allowing for an enhanced coupling between optical and elastic waves. In PhC-based solutions, slow light effects at the band gap edges allow for an increase in the interaction time and therefore in the effective interaction strength between the optical field and any external field applied to the medium. It has, for example, been shown that an enhancement factor of 312 times can be obtained in the case of an electro-optical modulation of an optical signal going through a two-dimensional (2D) PhC.[2] In this paper, we investigate the acousto-optical counterpart of such an effect. Up to now, acousto-optical control of PhCs has mostly been investigated for one-dimensional structures, as in semiconductor-based PhCs.[8–10] Here, we focus on a fully integrated configuration exploiting SAWs and 2D-PhCs written on optical waveguides. The developments are performed on a lithium niobate ($LiNbO_3$) substrate in view of exploiting its strong acousto-optical and piezoelectric coefficients.

The proposed device is schematically depicted in Fig. 1. It consists of a square lattice PhC integrated on a graded-index optical waveguide for transverse electric (TE) waves and surrounded by a pair of interdigital transducers (IDTs). Each IDT generates a Rayleigh SAW that propagates along the Z-axis of the $LiNbO_3$ crystal. The PhC was initially designed to have one of its spectral gap edge at 1500 nm for TE-polarized waves. This configuration offers the ability to control the output intensity; any external effect applied to the crystal and affecting the material refractive index will result in a shift in the band edge and hence in a modulation of the output optical signal. In this particular case, the strain and the piezoelectric field accompanying the acoustic wave propagation are expected to induce, respectively, an elasto- and an electro-optical modification of the refractive index. These contributions cause a change in the optical and structural properties of the PhC, provoking a shift in the spectral position of the photonic gap in the transmission response.

To increase the acousto-optical interaction strength, the geometrical properties of the fabricated PhC were initially

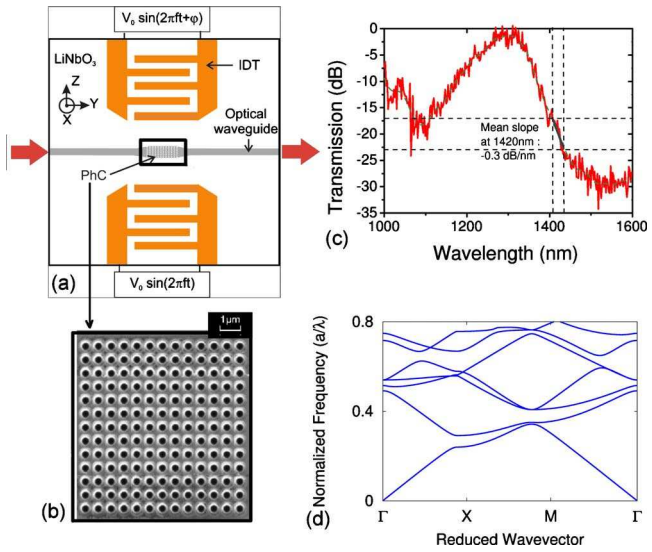


FIG. 1. (Color online) (a) Schematics of the acousto-optic modulators. (b) Scanning electron microscope image of the fabricated square lattice air/$LiNbO_3$ PhC. Pitch a=825 nm, diameter d=412 nm. (c) Measured optical transmission through the PhC (solid red line). Results obtained by normalizing the optical intensity transmitted through the nanostructured waveguide with the intensity through a single waveguide realized in the same conditions without any PhC. The dashed green line is the experimental result filtered using a low pass filter. (d) Corresponding band structure.

[a]Electronic mail: nadege.bodin@univ-fcomte.fr.

 © 2010 American Institute of Physics

Downloaded 27 Apr 2010 to 194.57.91.238. Redistribution subject to AIP license or copyright; see http://apl.aip.org/apl/copyright.jsp

chosen to compensate for the small length of the active section by increasing the interaction time and enhancing the optical field within the PhC. By using plane wave expansion calculations performed using the RSOFT BANDSOLVE™ software, we have determined that a good compromise can be reached between low group velocity and low radiation losses if the PhC is made of a square array of air holes with a diameter to pitch ratio d/a equals to 0.5. Under these conditions, the dispersion relation exhibits a flat band in the ΓX direction, as seen in Fig. 1(d). The group velocity was then deduced from the slope of this fourth band and estimated to be around $0.024c$, i.e., 21 times slower than the group velocity in a regular straight graded-index waveguide. This band lies at a normalized frequency $a/\lambda=0.55$, where λ is the wavelength, hence imposing a period $a=825$ nm for operation at a wavelength of 1500 nm.

The PhC was fabricated on a 0.5 mm thick X-cut $LiNbO_3$ wafer. The optical graded-index waveguide was obtained through annealed proton exchange which, in the case of X-cut $LiNbO_3$, induces a guiding of the TE-polarized wave only. Proton-exchange was first achieved through a SiO_2 mask in benzoic acid at 180 °C for 2 h. The process was followed by an annealing of the obtained step-index optical waveguide at 333 °C for 4 h. With such experimental parameters, the optical core of the TE-polarized guided mode is estimated to be at 0.9 μm below the surface. The PhC itself was written on the waveguide by focused ion beam milling, as described in Ref. 11. The optical spectrum through the PhC was measured with a supercontinuum source and an Optical Spectrum Analyzer (Anritsu MS9710A) as described in Ref. 2. The resulting normalized transmission through the PhC is displayed in Fig. 1(c); it showed a gap between 1300 and 1750 nm and an extinction ratio of −30 dB between the maximum output intensity at 1300 nm and the minimum output intensity at 1500 nm. The small peaks that can be seen in the measured transmission response [see for example the one at 1400 nm in Fig. 1(c)] are assumed to be due to a Fabry–Perot effect between the PhC structure and the output of the waveguide. A smoothing of the transmission response using a low-pass filter was then performed in order to eliminate this contribution and evaluate the mean slope between 1410 and 1430 nm. The smoothed transmission response is represented with a dashed green line in Fig. 1(c) and exhibits a mean slope value of -0.3 dB nm^{-1} ± 1 dB nm^{-1} at the operating wavelength of 1420 nm.

The two IDTs were subsequently fabricated by optical lithography and lift-off of a 200 nm thick evaporated aluminum layer. The transducers are identical, with an acoustic aperture of 400 μm and a period $p=9$ μm. The corresponding acoustic wavelength of 18 μm is then much larger than the optical waveguide width $w=5.5$ μm. This feature helps ensuring a constant amplitude of the acoustic wave across the PhC width. The overall electrical configuration was studied to reduce capacitive effects. The IDTs were then wire bonded to a printed circuit board designed to ensure impedance matching. Electrical excitation was achieved thanks to a single input electrical signal splitted and phaseshifted.

The SAWs are therefore generated with identical amplitudes and frequencies but with opposite directions of propagation. The resulting acoustic wave is then expected to exhibit an amplitude twice as large as the one obtained with a single IDT. The position of its maxima can be adjusted by changing the phase between the electric signals applied on each transducer. The resulting electrical transmission response S_{12} through the IDTs was measured with a network analyzer (Rhode & Schwarz ZVRC) and is reported with a solid black line in Fig. 2. The resonance frequency lies around 191.3 MHz, and the maximum of transmission through the connected IDTs was measured to be −7 dB, meaning that 44% of the electrical input power is converted into acoustic power at the resonance frequency.

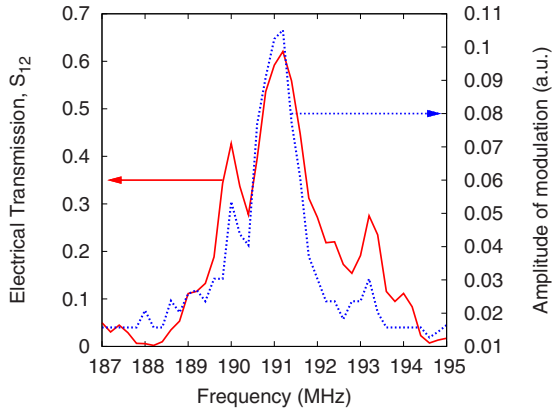


FIG. 2. (Color online) Amplitude of the optical intensity modulation (dashed blue line) in comparison with electric transmission s_{21} through the IDTs (solid red line).

Acousto-optical characterizations were then performed with a distributed feedback laser diode emitting at a wavelength of 1420 nm. The laser light was injected into the optical waveguide hosting the PhC. A power of 13 dBm at 191.3 MHz was here again applied at the entrance of the delay line, and the output voltage measured at the entrance of each IDT can be visualized in Fig. 3(a). As expected, the maximum of intensity modulation was obtained for an emission in phase and is reported in Fig. 3(b). The overall extinction ratio is around −5 dB. For a fixed delay between the two IDTs, the amplitude of modulation is maximum at the IDT resonance frequency and decreases when trailing away from it, as can be seen on the dashed line of Fig. 2. These results confirm that the acousto-optical effect predominates over pure electro-optical or thermo-optical effects, which are frequency independent. A contribution of the electro-optical effect can nevertheless be observed. Indeed, a residual modu-

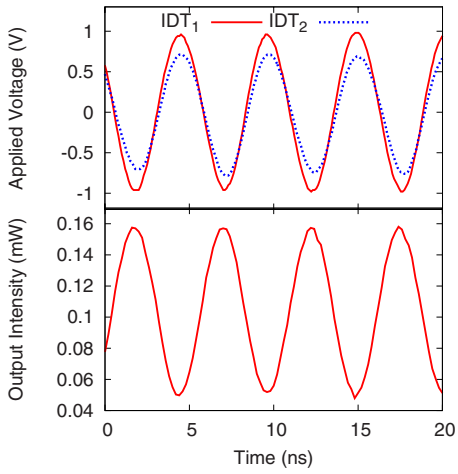


FIG. 3. (Color online) Modulation at 191.2 MHz. (a) Applied voltages on the two IDTs. (b) Resulting amplitude of the optical intensity modulation.

Downloaded 27 Apr 2010 to 194.57.91.238. Redistribution subject to AIP license or copyright; see http://apl.aip.org/apl/copyright.jsp

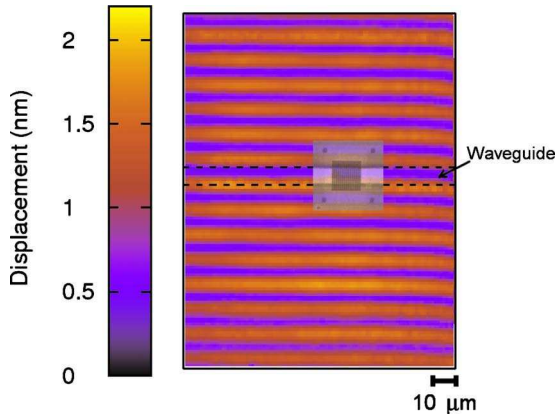


FIG. 4. (Color online) (a) Modulus of the vertical displacement field between the two IDTs measured using a laser heterodyne interferometer. A microscope image of the PhC and the optical waveguide is superimposed on the displacement image to show their actual position.

lation was measured far from the resonance, where the acousto-optical coupling is negligible (dashed curve of Fig. 2, i.e., at frequencies lower than 188 MHz or higher than 194 MHz). This residual modulation may be explained by the difference in amplitude between the signals applied to the IDTs. It can be seen in Fig. 3(b) that the signal applied to the first IDT is 0.23 V lower than the signal applied to the second one. This difference in amplitude generates an electrical field between the IDTs that does not depend on frequency. Previous works report that the electro-optically induced wavelength shift for the very same PhC structure is of 5 nm V^{-1},[2] resulting here in a shift of 1.15 nm and hence in a (0.35 ± 0.11) dB variation in the output intensity. This electro-optical contribution to intensity modulation should disappear with the use of a symmetric electrical splitter ensuring two strictly identical output voltages. Thus, an improvement of (0.35 ± 0.11) dB of the extinction ratio should be achieved. The frequency shift imputable to the acousto-optical modulation, corresponds to an extinction ratio of (5.4 ± 0.1) dB, hence resulting in a wavelength shift of (18 ± 6) nm as deduced from the mean slope value at 1420 nm measured on the transmission response. This change in wavelength can be directly translated in a variation in the refractive index using the simple relationship $\Delta\lambda = \lambda \cdot \Delta n/n$ where $n=2.143$ is the effective refractive index. The obtained index change is therefore as high as $(2.5 \pm 0.8) \times 10^{-2}$.

The actual refractive index induced by the surface wave in the homogeneous medium was then worked out independently from measurements of the elastic displacement field. A scanning heterodyne laser interferometer[12] was used to characterize the displacement field over a scan area of 100×150 μm^2 encompassing the PhC, with a lateral scanning step of 1 μm. The maximum amplitude was obtained for devices emitting in phase and the corresponding scanned amplitude field is reported in Fig. 4. The amplitude data were then averaged in the y direction to retrieve the vibration amplitude. For an applied electrical input power of 13 dBm (before splitting) at 191.3 MHz, the measured vibration amplitude is of about 1.2 nm. The corresponding refractive index change was eventually calculated following Ref. 13. The so-called indirect photoelastic effect, linked to the electro-optical contribution caused by the piezoelectric field carried by the propagating elastic wave,[14] was in addition taken into account, and the total refractive index change was then evaluated to be around 4.4×10^{-4}. The effective refractive index variation as felt by the PhC structure is then 61 times higher than the actual index change. Much similarly to what was observed with the electro-optical effect in Ref. 2, slow light phenomena linked to the dispersion properties of the PhC allows for a significant enhancement of the elasto-optical interaction, hence allowing for highly compact and efficient devices.

As a conclusion, we have demonstrated the feasibility of an acousto-optical micromodulator on $LiNbO_3$ substrates with an active length of only 13 μm. Modulation with an extinctio ratio of 5 dB was achieved at 200 MHz for a driving power of 20 mW only. The low driving power required demonstrates the influence of the photonic structure which increases the overall device efficiency by a factor of 61. Higher extinction ratios along with increased efficiency can be expected from an improvement of the PhC fabrication process (increase in side wall verticality) or by ensuring a joint confinement of sound and light. The obtained results open appealing perspectives for the realization of miniature dynamic optical circuits.

The authors gratefully acknowledge O. Gaiffe for his help with elastic displacement field measurements.

[1] M. Roussey, M. Bernal, N. Courjal, and F. Baida, Appl. Phys. Lett. **87**, 241101 (2005).
[2] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, D. V. Labeke, F. I. Baida, and R. Salut, Appl. Phys. Lett. **89**, 241110 (2006).
[3] M. Diwekar, V. Kamaev, J. Shi, and Z. V. Vardeny, Appl. Phys. Lett. **84**, 3112 (2004).
[4] L. Gu, W. Jiang, X. Chen, L. Wang, and R. T. Chen, Appl. Phys. Lett. **90**, 071105 (2007).
[5] E. A. Camargo, H. M. H. Chong, and R. M. D. L. Rue, Opt. Express **12**, 588 (2004).
[6] F. Verluise, V. Laude, Z. Cheng, C. Spielmann, and P. Tournois, Opt. Lett. **25**, 575 (2000).
[7] R. M. White and F. W. Voltmer, Appl. Phys. Lett. **7**, 314 (1965).
[8] P. V. Santos, J. Appl. Phys. **89**, 5060 (2001).
[9] M. M. de Lima, Jr., R. Hey, and P. V. Santos, Appl. Phys. Lett. **83**, 2997 (2003).
[10] P. D. Batista, B. Drescher, W. Seidel, J. Rudolph, S. Jiao, and P. V. Santos, Appl. Phys. Lett. **92**, 133502 (2008).
[11] F. Lacour, N. Courjal, M.-P. Bernal, A. Sabac, C. Bainier, and M. Spajer, Opt. Mater. (Amsterdam, Neth.) **27**, 1421 (2005).
[12] P. Vairac and B. Cretin, Opt. Commun. **132**, 19 (1996).
[13] D. Gérard, V. Laude, B. Sadani, A. Khelif, D. V. Labeke, and B. Guizal, Phys. Rev. B **76**, 235427 (2007).
[14] R. V. Schmidt, IEEE Trans. Sonics Ultrason. **23**, 22 (1976).

Downloaded 27 Apr 2010 to 194.57.91.238. Redistribution subject to AIP license or copyright; see http://apl.aip.org/apl/copyright.jsp

Micron 41 (2010) 742–745

Contents lists available at ScienceDirect

Micron

journal homepage: www.elsevier.com/locate/micron

Enhanced optical transmission by light coaxing: Mechanism of the TEM-mode excitation

F.I. Baida[a,*], A. Belkhir[b], O. Arar[a,b], E.H. Barakat[a], J. Dahdah[a], C. Chemrouk[b], D. Van Labeke[a], C. Diebold[c], N. Perry[c], M.-P. Bernal[a]

[a] Dépatement d'Optique P.M. Duffeux, Institut FEMTO-ST UMR 6174 CNRS, Université de Franche–Comté, 25030 Besançon Cedex, France
[b] Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algeria
[c] Service Commun Informatique, Institut FEMTO-ST UMR 6174 CNRS, 25030 Besançon Cedex, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 5 April 2010
Received in revised form 18 June 2010
Accepted 18 June 2010

Keywords:
Enhanced transmission
FDTD
Nano-waveguides

ABSTRACT

This paper presents a theoretical study showing the mechanism of light transmission through opaque metallic films perforated with nanocoaxial apertures thanks to the excitation of their cutoff-free TEM (Transverse ElectroMagnetic) guided mode. Full three-dimensional Finite Difference Time Domain (3D-FDTD) together with a Body-Of-Revolution FDTD simulation results are presented and discussed in order to optimize this extraordinary transmission. Very promising findings are pointed out opening the path to the design of new devices for both nano-optic and photovoltaic applications.

© 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Extraordinary optical transmission (EOT) has became a well-known phenomenon thanks to extensive theoretical and experimental studies. The EOT accounts for the transmission enhancement of the electromagnetic waves through opaque plates (generally fabricated with metal) perforated with subwavelength apertures. The term EOT is used every time the obtained transmission through the set of apertures is more larger than the sum of the transmission through the apertures considered separately [1]. The origin of the light transmission depends on the considered structure. For 1D periodic slits, the excitation of the TEM guided mode i.e. the mode where the electric field is perpendicular to the slit direction gives rise to large transmission [2] because of the efficient overlap between the incident plane wave and this mode. This TEM mode does not have a cutoff frequency and the transmission peak position is given by a phase matching resonance condition. The drawback of such structures is their polarization sensitivity. In fact, only the electric field component that is perpendicular to the slit direction can be transmitted through the structure acting exactly like a polarizer.

In order to enhance the transmission independently of the polarization, one can consider cylindrical aperture arrays. In this case, an increased transmission is obtained for wavelengths corresponding to the excitation of surface plasmon resonances of the metal-dielectric interfaces [3,4]. Consequently, the transmission peak position is directly related to the grating period through a simple equation. In addition to the polarization, this kind of structures are also sensitive to the angle of incidence because of the surface plasmon excitation.

In order to combine the advantage of these two structures (slits and cylindrical apertures), annular aperture arrays (AAA) were proposed [5,6], theoretically studied [7–11] and characterized [12–16] over a large interval of the electromagnetic spectrum (see Fig. 1). In all these studies, the EOT is associated with the excitation, inside the apertures, of the the TE_{11} mode which has a cutoff wavelength. The excitation of the annular apertures TEM mode was firstly proposed in Ref. [5]. Only few papers have discussed on this mode [17,18] while its excitation conditions were recently pointed out in Ref. [19]. In this letter, we discuss the potential role of this mode in the context of the EOT.

As mentioned above, in the case of AAA, the EOT can be efficiently obtained thanks to the two higher guided modes namely the TEM and the TE_{11} modes. Historically, and due to symmetry considerations, EOT was firstly demonstrated (theoretically and experimentally) by exciting the TE_{11} mode at its cutoff wavelength [13,14,20]. On the other hand, it was demonstrated that the TEM mode, which has no cutoff frequency, can only be excited with an incident plane wave under two conditions: an off-normal incidence (wavevector not collinear with the symmetry-axis of the waveguide) and a TM polarization [19].

EOT in which the TEM mode is excited displays new characteristics. One of the most important properties of the TE_{11} mode is the fact that it is the "higher" guided mode that has a cutoff

* Corresponding author. Tel.: +33 3 81 66 64 21; fax: +33 3 81 66 64 23.
E-mail address: fbaida@univ-fcomte.fr (F.I. Baida).

0968-4328/$ – see front matter © 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.
doi:10.1016/j.micron.2010.06.009

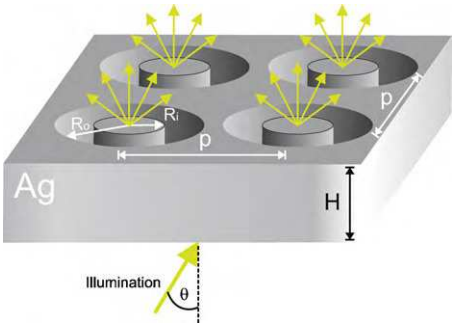


Fig. 1. Schematic of a conventional annular aperture array (AAA) structure. R_o is the outer radius, R_i is the inner one, P is the period and θ is the angle of incidence.

frequency. When illuminating the AAA structure by a plane wave (independently of the incidence direction), the transmission spectrum always presents a peak at the cutoff wavelength of the TE_{11} mode [21]. In addition, if the metal is thick enough, Fabry–Pérot harmonics of this mode appear (see Fig. 3 of Ref. [5]). The existence of a cutoff frequency insures the presence of EOT at this frequency as long as it is not disturbed by Rayleigh or Wood anomalies. Unfortunately, the TEM-based EOT can only be obtained for thick metal plates. In fact, the wavelengths of the transmission peaks are only given by a phase matching condition that can be written as:

$$\lambda_{TEM} = \frac{2\pi n'_{eff} H}{m\pi - \phi_r} \quad (1)$$

where n'_{eff} is the real part of the effective index of the TEM mode, ϕ_r is the phase change induced by the reflection on the two ends of the coaxial waveguide, H is the metal film thickness and m is an integer. Note that both n'_{eff} and ϕ_r depend on the wavelength value. Consequently, similarly to a conventional Fabry–Pérot interferometer, by changing H, it is possible to tune the value of the transmitted light wavelength. Thus, the question is: can we obtain more efficient EOT through the TEM mode than with the TE_{11} one? The answer is not obvious because, in addition to the geometrical parameters, the metal dispersion (more precisely the absorption) plays a key role in the determination of the transmission at a given wavelength. For an AAA made in a perfect electric conductor (PEC), the response of the above question becomes simpler. A PEC is an ideal material without losses and with an infinite conductivity. In this case, the absence of the absorption allows the presence of an efficient TEM peak at oblique incidence for a given value of the wavelength by adjusting the metal film thickness. This becomes dramatically difficult in the case of a real metal with absorption especially in the visible range. In this case, both real and imaginary parts of the effective index of the TEM-like mode depend on the nano-waveguide radii (see Fig. 2). Therefore, in order to optimize the light transmission through an AAA thanks to a TEM mode, we have to optimize the transmitted efficiency by determining all the structure parameters including the optical parameters of the used metal.

Fig. 3 shows the transmission spectra of a perfectly symmetrical AAA (perfect conductor in (a) and silver [27] in (b)) illuminated with a TM polarized plane wave impinging on the structure at $\theta = 45^\circ$. The geometrical parameters of the considered structures are given in the caption of the same figure. One can conclude that the appearance and the position of the TEM peak transmission are directly related to the metal thickness.

In addition, one notices that, even if the imaginary part of the TEM mode effective index decreases with increasing wavelength values (see Fig. 4d of Ref. [19]), the height of the TEM peak decreases due to the larger value of the thickness needed to obtain the first harmonic of the Fabry–Pérot resonance inside the apertures. On

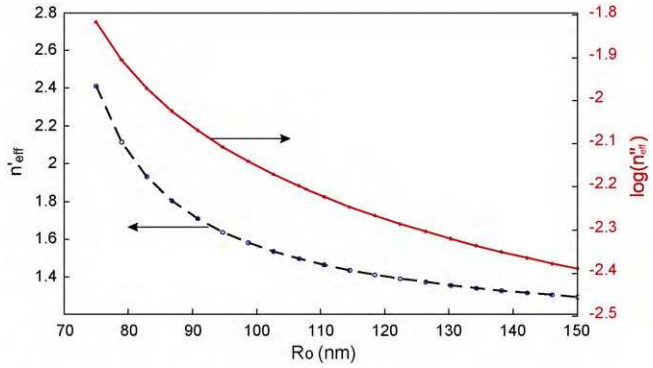


Fig. 2. Real part n'_{eff} and $\log_{10}$ of the imaginary part n''_{eff} of the effective index associated with the TEM-like mode of an infinite coaxial waveguide as a function of the outer radius R_o. The inner radius is set to $R_i = 65$ nm and the working wavelength is $\lambda = 1550$ nm.

the other hand, it is clearly seen from the same Fig. 3a and b, that the coupling between the TE_{11} and the TEM modes plays a negative role on the global transmission. The linear behavior obtained elsewhere is completely broken near the coupling zone. Furthermore, the values of the phase shift ϕ_r can be deduced from Fig. 3a and b replacing in Eq. (1) n_{eff} by 1 for a perfect conductor AAA and by 1.35 in the case of silver (deduced from Fig. 2). This leads to almost constant and small values of $\phi_r^{PC} = 7.34^\circ$ and $\phi_r^{Ag} = 1.84^\circ$.

From Fig. 3b that corresponds to a silver AAA, we set the geometrical parameters to $R_o = 130$ nm, $R_t = 65$ nm and $H = 495$ nm in order to get a TEM transmission peak at the operating wavelength $\lambda = 1550$ nm (see Fig. 4a). Note that the peak position is independent of the incidence angle. Only its amplitude is affected by this value [19]. In addition, we demonstrate that EOT can be obtained for wavelengths greater than the peak position of the TE_{11} mode. Consequently, light propagation and transmission through a very long (transmission line) nanocoaxial waveguide is prohibited because of the absorption associated with the TEM mode. The imaginary part of the wavevector associated with the TEM mode is too large to reckon on light propagation over distance greater than 30 μm

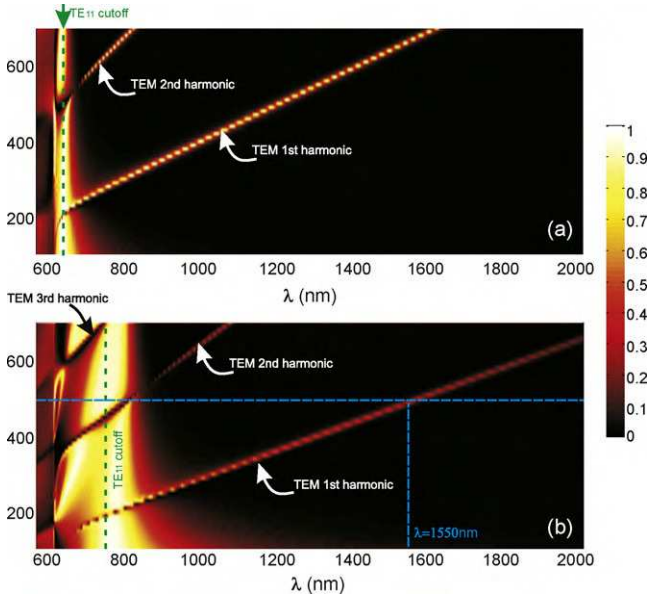


Fig. 3. Zero-order transmission spectra of two AAA made in perfect conductor (a) and in silver (b) as a function of the metal film thickness. The geometrical parameters of the structure are: $R_o = 130$ nm, $R_i = 65$ nm and $p = 65$ nm. In both cases, the incident plane wave illuminates the structure at $\theta = 45^\circ$ and it is TM polarized (magnetic field parallel to the metallic film).

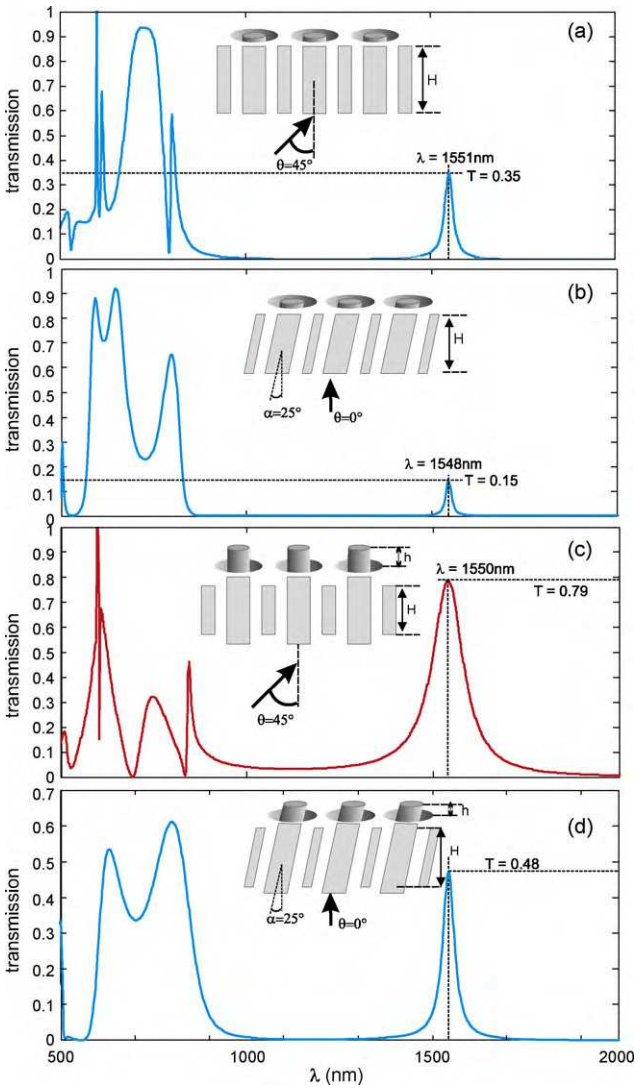


Fig. 4. Zero-order transmission spectra for various AAA configurations where outer and inner radii are fixed to R_o = 130 nm and R_i = 65 nm, respectively. (a) Conventional structure illuminated at 45° corresponding to the dashed blue line of Fig. 3b (metal thickness of H = 495 nm). (b) Tilted AAA of 25° with respect to the vertical direction. The thickness of the metallic film (H = 430 nm) was chosen to correspond to a TEM peak transmission at λ = 1550 nm. (c) Classical AAA structure with inner metallic parts that stretch out from the metallic film over a distance h = 80 nm. This allows increasing of the impedance matching between the in- and out-coming plane waves with the TEM guided mode inside the apertures. The metal thickness is also adjusted to H = 418 nm in order to get a TEM peak at λ = 1550 nm. (d) Combination of the two last configurations demonstrating efficient TEM-mode excitation under normal incidence.

in the visible and the near infrared domains [22]. This can be partially bypassed by replacing the inter-conductor material, which is vacuum, by a high dielectric constant one. Consequently, the TEM peak transmission efficiency can be enhanced considering a thinner metallic film allowing the same optical path inside the apertures.

Unfortunately, the original idea of using coaxial nano-waveguides as transmission lines seems to be hardly applied [23] using conventional AAA [24] not only because of the absorption occurring during the propagation but also because of the small overlap between the incident wave and the TEM guided mode. In fact, independently of the incident homogeneous beam, the coupling remains weak because every nanoguide locally "sees" a plane wave due to its dimension compared with the illuminating wavelength. Therefore novel solutions must be found to get around this difficulty.

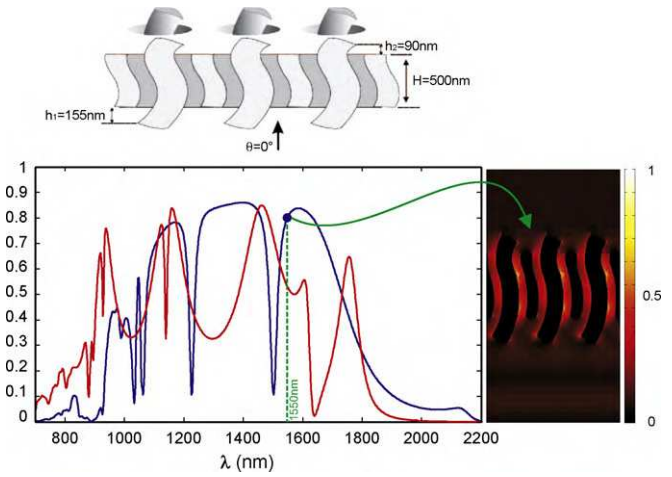


Fig. 5. Transmission spectra through the AAA structure presented on the top. The outer and inner radii are fixed to λ = 130 nm and R_i = 65 nm, respectively. As in Fig. 4c and d, the length of the conductor core part (H + 2h) is larger than the metal film thickness (H). The dashed red curve corresponds to the case where only the inner part of the apertures is filled with a dielectric material (n = 2.2) as presented on the above schema while the whole structure is surrounded by this dielectric for the blue solid curve. Normalized electric field amplitude distribution in the plane (x, z) passing through the aperture axis at λ = 1550 nm is presented on the right. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of the article.)

In the same paper [23], the authors suggested the use of specific nano-antennas that allow enhancement of the radiation coupling. Here we propose to study some configurations consisting on original ways for the excitation of the TEM mode without respecting either the angle of incidence or the polarization. The first proposed configuration was suggested by the group of J.J. Greffet at Ecole Centrale Paris [25]. It consists on the excitation of the TEM mode at normal incidence by tilting the axis of the annular apertures (see inset of Fig. 4b). Such structure is equivalent to conventional AAA illuminated at oblique incidence and does not bring substantial improvement to the enhancement of the coupling with the TEM mode. Nevertheless, it can be useful for photovoltaic applications where it is possible to sacrifice certain directions of illumination and certain polarizations. A typical transmission spectrum is presented in Fig. 4b where geometrical parameters were adapted to get the TEM transmission at λ = 1550 nm.

Another well-known solution that is currently used in the radio-frequency domain to increase the impedance adaptation between a coaxial antenna and the vacuum consists in stretching out the central metallic part of the nanocoax with respect to the outside electrode. This configuration was implicitly used in Ref. [23] to achieve 90% light transmission thanks to the excitation of the TEM mode. This kind of structure modification is readily achievable at radio frequencies. This is more difficult in the visible range but remains possible through manufacturing process having a nanometric resolution (Focused Ion Beam, Reactive Ion Etching, ...). Nonetheless, as in the case of conventional AAA, the TEM mode is not excited neither at normal incidence nor in TE polarization. The main advantage of this solution is to increase the coupling both at the entrance and the exit sides and to allow decreasing the metal film thickness for a fixed wavelength value (see Fig. 4c).

According to these last results, one can propose a hybrid configuration such as the one presented in Fig. 5 combining all the possible schemes and corresponding to a "realistic" model of the AAA structure considered in the studies of Kempa team [26]. From all geometrical parameters of the nanotube array, only the period and the radii are fixed as in Fig. 4. However, the axis-symmetry of the aperture is broken by shifting (both in the x and y directions) the center of the circular section of the nano-waveguide with respect

to the vertical axis. In addition, the inner part is stretched out differently from the two sides of the metallic film and the inter-conductor space and/or the (substrate + superstrate) are filled by a dielectric material ($\varepsilon = 4.84$). The obtained transmission spectrum shows a complex structure composed of both TE_{11} and TEM peaks so in which one gets non-zero transmission for almost every wavelength between 500 and 2000 nm. The complex structure of the calculated spectra cannot simply connect the transmission value for a given wavelength to the geometric parameters of the structure. Roughly, one can insure that the minima appearing in these spectra, looking like absorption peaks on a continuum (see for instance peaks α and β in Fig. 5), are directly linked to the presence of a strong coupling between the TE_{11} mode and the various TEM peaks as it is shown in Fig. 3.

This result points out the reason of the light transmission experimentally observed in Refs. [17,26] even if the transmitted efficiency is weak. We can say that a coaxial structure with some defects (protuberances breaking the axial symmetry of one coaxial aperture) at the entrance and the exit sides seems more appropriate for transmission through the TEM mode than the perfect conventional structure. In this case, the fabrication defects are beneficial and could lead to more efficient structures.

References

Ebbesen, T.W., Lezec, H.J., Ghaemi, H.F., Thio, T., Wolff, P.A., 1998. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. Nature 391, 667–669.

Astilean, S., Lalanne, Ph., Palamaru, M., 2000. Light transmission through metallic channels much smaller than the wavelength. Opt. Commun. 175, 667–669.

Ghaemi, H.F., Thio, T., Grupp, D.E., Ebbesen, T.W., Lezec, H.J., 1998. Surface plasmons enhance optical transmission through sub-wavelength holes. Phys. Rev. B 58, 6779–6782.

Martin-Moreno, L., Garca-Vidal, F.J., Lezec, H.J., Pellerin, K.M., Thio, T., Pendry, J.B., Ebbesen, T.W., 2001. Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays. Phys. Rev. Lett. 86 (6), 1114–1117.

Baida, F.I., Van Labeke, D., 2002. Light transmission by subwavelength annular aperture arrays in metalic films. Opt. Commun. 209, 17–22.

Baida, F.I., Van Labeke, D., 2003. Three-dimensional structures for enhanced transmission through a metallic film: annular aperture arrays. Phys. Rev. B 67, 155314.

Baida, F.I., vanLabeke, D., Guizal, B., 2003. Enhanced confined light transmission by single subwavelength metallic apertures. Appl. Opt. 42 (34), 6811–6815.

Baida, F.I., Poujet, Y., Guizal, B., Van Labeke, D., 2005. New design for enhanced transmission and polarization control through near-field optical microscopy probes. Opt. Commun. 256, 190–195.

Haftel, M.I., Schlockermann, C., Blumberg, G., 2006. Role of cylindrical surface plasmons in enhanced transmission. Appl. Phys. Lett. 88, 193104.

Orbons, S.M., Haftel, M.I., Schlockermann, C., Freeman, D., Milicevic, M., Davis, T.J., Luther-Davies, B., Jamieson, D.N., Roberts, A., 2008. Dual resonance mechanisms facilitating enhanced optical transmission in coaxial waveguide arrays. Opt. Lett. 33, 821–823.

Baida, F.I., Poujet, Y., Salvi, J., Van Labeke, D., Guizal, B, 2009. Extraordinary transmission beyond the cut-off through sub-λ annular aperture arrays. Opt. Commun. 282, 1463–1466.

Fan, Wenjun, Zhang, Shuang, Minhas, Babar, Kevin, J.M., Brueck, S.R.J., 2005. Enhanced infrared transmission through subwavelength coaxial metallic arrays. Phys. Rev. Lett. 94, 033902.

Salvi, J., Roussey, M., Baida, F.I., Bernal, M.-P., Mussot, A., Sylvestre, T., Maillotte, H., Van Labeke, D., Perentes, A., Utke, I., Sandu, C., Hoffmann, P., Dwir, B., 2005. Annular apertures arrays (AAA): first study in the visible region of the electromagnetic spectrum. Opt. Lett. 30 (13), 1611–1613.

Poujet, Y., Salvi, J., Baida, F.I., 2007. 90% extraordinary optical transmission in the visible range through annular aperture metallic arrays. Opt. Lett. 32, 2942–2944.

Fan, W., Zhang, S., Panoiu, N.-C., Abdenour, A., Krishna, S., Osgood, R.M., Malloy, K.J., Brueck, S.R.J., 2006. Second harmonic generation from a nanopatterned isotropic nonlinear material. Nano Lett. 6, 1027–1030.

Rollinson, C.M., Orbons, S.M., Huntington, S.T., Gibson, B.C., Canning, J., Love, J.D., Roberts, A., Jamieson, D.N., 2009. Metal-free scanning optical microscopy with a fractal fiber probe. Opt. Eng. 17, 1772.

Rybczynski, J., Kempa, K., Herczynski, A., Wang, Y., Naughton, M.J., Ren, Z.F., Huang, Z.P., Cai, D., Giersig, M., 2007. Subwavelength waveguide for visible light. Appl. Phys. Lett. 90, 021104.

Thio, T, 2007. Photonic devices: coaxing light into small spaces. Nat. Nanotechnol. 2, 136–138.

Baida, F.I., 2007. Enhanced transmission through subwavelength metallic coaxial apertures by excitation of the TEM mode. Appl. Phys. B 89 (2–3), 145–149.

Baida, F.I., Van Labeke, D., Granet, G., Moreau, A., Belkhir, A., 2004. Origin of the super-enhanced light transmission through a 2-d metallic annular aperture array: a study of photonic bands. Appl. Phys. B 79 (1), 1–8.

Belkhir, A., Baida, F.I., 2008. Three-dimensional finite-difference time-domain algorithm for oblique incidence with adaptation of perfectly matched layers and nonuniform meshing: application to the study of a radar dome. Phys. Rev. E 77, 056701.

Peng, Y., Wang, X., Kempa, K., 2008. TEM-like optical mode of a coaxial nanowaveguide. Opt. Eng. 16, 1758.

Kempa, K., Wang, X., Ren, Z.F., Naughton, M.J., 2008. Discretely guided electromagnetic effective medium. Appl. Phys. Lett. 92, 043114.

Conventional AAA corresponds to coaxial apertures with cylindrical axis perpendicular to the mean plane of the metal interface. In addition, for all apertures, the inner and the outer parts have the same thickness than the metallic film (see Fig. 1).

Samuel Nosal, 2009. Modélisation de structures périodiques et matériaux artificiels: application à la conception d'un radôme passe-bande. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.

Wang, Y., Kempa, K., Kimball, B., Carlson, J.B., Benham, G., Li, W.Z., Kempa, T., Rybczynski, J., Herczynski, A., Ren, Z.F., 2004. Receiving and transmitting light-like radio waves: antenna effect in arrays of aligned carbon nanotubes. Appl. Phys. Lett. 85, 2607.

A Drude model is used to describe the metal dispersion $\varepsilon(\omega) = 1 - \left(\omega_p^2/\omega(\omega + i\gamma)\right)$ with $w_p = 0.138 \times 10^{17}$ rad/s and $\gamma = 0.307 \times 10^{14}$ rad/s.

Résumé

Les travaux de thèse reposent sur l'étude et le développement des structures photoniques sur niobate de lithium pour des applications capteurs de gaz. L'originalité du travail est d'étudier l'effet de l'absorption des couches de porphyrines spécifiques à la détection du benzène et déposées sur le cristal photonique sur la réponse spectrale de ce dernier. En premier lieu, une étude théorique par des méthodes numériques, maîtrisées au laboratoire d'optique (FDTD, PWE), était nécessaire pour étudier l'effet de la présence de certains gaz sur la réponse spectrale des cristaux photoniques. Nous avons montré qu'avec la structure choisie, une variation de la transmission de 23% est obtenue lorsque le système est exposé à 50 ppm de benzène. La sensibilité de la structure au benzène est estimée à 2.3 ppm. En second lieu, nous avons étudié des réalisations en salle blanche des structures photoniques. En utilisant la méthode de gravure directe par faisceau d'ions focalisé (FIB), on a réalisé plusieurs cavités photoniques sur des guides d'ondes optiques fabriqués en collaboration avec Photline Technologies. Un banc de caractérisation automatisé (interface GPIB) en réflexion et en transmission est monté pour vérifier les prédictions théoriques. Les résultats expérimentaux obtenus coïncident avec les prédictions théoriques. En plus, des études théoriques et expérimentales en champ proche optique ont été réalisées pour mettre en évidence la résonance des cavités gravées sur niobate de lithium. Ainsi, ces études expérimentales sont les premières sur ce type de matériau.

Mots clés : Cristal photonique, Niobate de lithium, FDTD, PWE, cavité photonique, guide d'onde.

Abstract

In this thesis we show how photonic crystal cavities can be exploited for sensing application, provided that they are filled with a sensitive absorbent layer. A Lorentz dispersion model implemented in a 2D-FDTD code show that the absorption of the layer can be exploited for enhancing the sensitivity of the sensor. We found that a variation of the refractive index of 10^{-7} leads to a variation of the transmittivity of 23% at the resonance peak. Also, we will report the first study and realization of two types of lithium niobate photonic cavities ($LiNbO_3$ PhCs). The choice of the $LiNbO_3$ substrate is motivated by its capability of combining piezoelectric, electro-optical, acousto-optical, non-linear optical properties, which offers the perspective of controlling the operating point of photonic devices such as sensors. The cavities were fabricated by focused ion beam (FIB) milling, on annealed proton exchange (APE) strip waveguide. Numerical analysis with plane wave expansion method (PWE) has been realized to define the lattice parameters of the studied structures. The parameters were chosen to obtain a resonance mode at λ=1550 nm. This study was followed by finite difference time domain (FDTD) simulations to extract the transmission and reflexion spectra of the cavities. Experimental setup was mounted to characterize the PhCs cavities, where the incident light consists of a supercontiuum powerful white source. In addition, experimental near field measurements (SNOM) show the presence of a resonance mode at the defect region of the cavity.

Keywords: Photonic crystal cavity, Lithium niobate, FDTD, PWE, Optical waveguuide.