

**Faculté de génie**

Département de génie électrique et informatique  
Sherbrooke (Québec)  
Canada J1K 2R1



Mémoire de maîtrise en sciences appliquées  
Spécialité : génie électrique

par

**Dominic CARRIER**

## INTERFÉROMÉTRIE AUTO-RÉFÉRENCÉE PAR PLASMONS DE SURFACE ~ UNE APPROCHE VERS LA BIODÉTECTION ~

*« En se basant sur la théorie électromagnétique des modes couplés dans les structures laminaires pour créer le tissu théorique et des simulations FEM pour effectuer les démonstrations préliminaires, l'objectif de cette maîtrise est d'ajouter à la surface d'un biodétecteur SPR (résonance de plasmons de surface) une microstructure permettant une mesure interférométrique de l'indice de réfraction. »*

Jury : Jan J. DUBOWSKI (directeur)  
Andrei KABASHIN  
Denis MORRIS

Déposé le : 2010/11/15



# INTERFÉROMÉTRIE AUTO-RÉFÉRENCÉE PAR PLASMONS DE SURFACE : UNE APPROCHE VERS LA BIODÉTECTION

*Self-referenced surface plasmons interferometry: A way towards biosensing*

---

L'accessibilité aux techniques d'analyse avancées est souvent un problème pour l'établissement des diagnostics posés par le personnel médical. Les techniques classiques requièrent souvent des installations considérables (laboratoires d'analyses) ou utilisent des équipements volumineux et difficilement disponibles.

Dans le but de résoudre ce problème, l'usage d'une plateforme technologique composée de l'intégration partielle d'un biodétecteur sur une structure auto-émettrice est un intéressant point de départ. Cette plateforme considère le problème d'accessibilité à la technologie directement en réduisant la taille et le coût relié à celle-ci. L'usage d'une structure compatible aux procédés de microfabrication couramment utilisés dans l'industrie de la microélectronique indique la possibilité d'augmenter l'échelle de production aisément et à faible coût.

En contrepartie, les systèmes non intégrés sont généralement plus polyvalents sur les procédés de détection possibles mais aussi plus sensible, grâce à des systèmes optiques complexes. L'intégration d'un système interférométrique et son couplage à la plateforme technologique déjà existante permettraient l'implémentation d'une mesure basée sur la détection de phase additionnelle à la mesure classique de l'intensité, menant ainsi à l'augmentation de la sensibilité du biodétecteur.

En se basant sur la théorie électromagnétique des modes couplés dans les structures laminaires pour créer le tissu théorique et sur des simulations FEM (modélisation par éléments finis) pour effectuer les démonstrations préliminaires, l'objectif de cette maîtrise consiste à étudier les caractéristiques d'un biodétecteur SPR (résonance de plasmons de surface) dont la mesure d'indice de réfraction de surface utilise une approche interférométrique. Pour ce faire, une microstructure est ajoutée à la surface du biodétecteur pour coupler une lumière incidente cohérente aux modes de surface.

Ces modes de surface sont le produit de l'interaction et de l'interférence des plasmons diffractés par les différentes composantes de la microstructure. Dans un cas de microstructure simple, par exemple une paire de réseaux finis adjacents, l'analyse détaillée de l'interaction des plasmons diffractés est possible, comme il sera démontré dans ce document. Cette interaction sera ensuite liée à la forme de la résonance de la structure et comparée à d'autres cas simples, dont une structure classique de SPR.

Cette transformation de la forme de la résonance augmente la précision globale de la mesure du biodétecteur sans en augmenter grandement la complexité. La méthode interférométrique promet des résultats très intéressants sous certain paramètres, aussi mis en évidence dans ce mémoire.

Mots-clés : Interférométrie ; SPR ; FEM ; Plasmons de surface ; Réseaux de diffraction.



# Table des matières

|   |    |
|---|----|
| INTRODUCTION.....   | 1  |
| CHAPITRE 1 – CONCEPTS DE BASE .....   | 5  |
| 1.1 – Concepts de biodétection .....  | 5  |
| 1.1.1 – Mesure de propriétés physiques .....  | 6  |
| 1.1.2 – Couches de fonctionnalisation biologique.....   | 7  |
| 1.1.3 – Biodétection.....   | 8  |
| 1.1.4 – Fiabilité et orthogonalité .....  | 9  |
| 1.2 – Résonance de plasmon de surface .....   | 9  |
| 1.2.1 – Nature intrinsèque des plasmons de surface .....  | 10 |
| 1.2.2 – Méthodes de couplage .....  | 11 |
| 1.2.3 – Effet de résonance.....   | 15 |
| 1.3 – Outils d'expérimentation .....  | 15 |
| CHAPITRE 2 – MÉTHODOLOGIE DE VÉRIFICATION DES SIMULATIONS .....   | 17 |
| 2.1 – Expériences classiques .....  | 17 |
| 2.1.1 – Architecture de réfraction simple .....   | 17 |
| 2.1.2 – Architecture de réflexion totale interne.....   | 19 |
| 2.1.3 – Interface entre deux diélectriques séparés par un métal.....  | 20 |
| 2.2 – Couplage lumière – plasmons de surface .....  | 21 |
| 2.2.1 – Distinction entre onde évanescente et SP.....   | 21 |
| 2.2.2 – Équivalence entre le couplage direct et le couplage par diffraction (0 <sup>ème</sup> et 1 <sup>er</sup> ordre) ..... | 23 |
| 2.3 – Vérifications des propriétés des plasmons de surfaces .....   | 25 |
| 2.3.1 – Solution des équations de Maxwell .....   | 26 |
| 2.3.2 – Calcul analytique et simulations .....  | 27 |
| CHAPITRE 3 – MÉTHODES DE SIMULATIONS FEM ET PLASMONS DE SURFACE.....  | 31 |
| 3.1 – Architecture sans diffraction .....   | 31 |
| 3.2 – Architecture perturbée .....  | 33 |
| 3.3 – Architecture avec réseau infini.....  | 34 |
| 3.3.1 – Restriction des analyses.....   | 34 |
| 3.3.2 – Restriction de la simulation .....  | 35 |
| CHAPITRE 4 – PROPOSITION D'UN INTERFÉROMÈTRE PLASMONIQUE .....  | 39 |
| 4.1 – Intégration d'un système interférométrique plasmonique .....  | 39 |
| 4.1.1 – Révision de l'interférométrie .....   | 40 |
| 4.1.2 – Réseaux finis : sources cohérentes de SP .....  | 41 |

|   |    |
|---|----|
| 4.1.3 – Système interférométrique intégré .....                           | 44 |
| 4.2 – Mode 1 – Interférométrie seulement .....                            | 46 |
| 4.2.1 – Réponse spectrale .....   | 47 |
| 4.2.2 – Indices de réfraction .....                                       | 49 |
| 4.2.3 – Indice de réfraction et réponse spectrale .....                   | 51 |
| 4.2.4 – Sensibilité de l'interféromètre .....                             | 52 |
| 4.2.5 – Observabilité au champ lointain .....                             | 57 |
| 4.3 – Mode 2 – SPR et interférométrie simultanée .....                    | 58 |
| 4.3.1 – Déplacement de la résonance.....                                  | 59 |
| 4.3.2 – Lien entre les conditions d'interférence et la résonance.....     | 60 |
| 4.3.3 – Architecture à réseaux multiples .....                            | 62 |
| 4.4 – Utilité de l'architecture interférométrique .....                   | 63 |
| CONCLUSION .....  | 65 |
| ANNEXE A – DÉTAILS DES SIMULATIONS .....                                  | 67 |
| A.1 – Paramètres généraux.....  | 67 |
| A.2 – Architectures utilisées .....                                       | 68 |
| A.2.1 – Architectures à réfraction simple .....                           | 68 |
| A.2.2 – Architectures SPR sans diffraction.....                           | 68 |
| A.2.3 – Architecture SPR avec réseau fini sans cavité.....                | 69 |
| A.2.4 – Architecture SPR avec réseaux finis et cavité .....               | 70 |
| A.2.5 – Architecture avec réseau infini ou réseau infini de cavités ..... | 71 |
| A.3 – Cas spéciaux.....   | 71 |
| A.3.1 – Indices de réfraction .....                                       | 71 |
| A.3.2 – Contenu en fréquence .....  | 71 |
| ANNEXE B – ANALYSE DE FOURIER .....                                       | 75 |
| B.1 – Réponse spectrale d'un réseau fini.....                             | 75 |
| B.2 – Équivalence entre les réponses spectrales en "k" et en "E" .....    | 77 |
| B.3 – Réponse spectrale de deux réseaux finis.....                        | 78 |
| RÉFÉRENCES.....   | 83 |

## Liste des figures

|   |    |
|---|----|
| Fig. 1.1 - Méthodes de mesures optiques d'une interaction surfacique .....  | 6  |
| Fig. 1.2 - Architecture TIR et relation de dispersion associée .....  | 12 |
| Fig. 1.3 - Relations de dispersion qualitatives pour une interface métal-diélectrique .....                                 | 13 |
| Fig. 1.4 - Procédure conceptuelle du couplage évanescent.....   | 14 |
| Fig. 1.5 - Relations de dispersion qualitative pour un réseau .....   | 15 |
| Fig. 2.1 - Architecture de simulation et vérification de la loi de Snell-Descartes .....                                    | 18 |
| Fig. 2.2 - Observation de la réflexion totale interne et de l'angle critique. ....  | 19 |
| Fig. 2.3 - Norme des champs de la SPR dans une architecture Kretschmann.....  | 21 |
| Fig. 2.4 - Couplage par ondes évanescentes de plasmons de surface (couplage Kretschmann).....                               | 22 |
| Fig. 2.5 - Couplage évanescent et couplage par diffraction.....   | 25 |
| Fig. 2.6 - Vecteur d'onde complexe du mode optique observé .....  | 28 |
| Fig. 3.1 - Schéma d'une architecture en couche sans diffraction .....   | 32 |
| Fig. 3.2 - Schéma d'une architecture en couche faiblement perturbée .....   | 33 |
| Fig. 3.3 - Observation de l'effet spatialement transitoire du couplage et de la déplétion provoquée d'un mode plasmon ..... | 37 |
| Fig. 4.1 - Conceptualisation d'un système interférométrique .....   | 40 |
| Fig. 4.2 - Architecture de simulation d'un réseau fini .....  | 42 |
| Fig. 4.3 - Efficacité de couplage d'un réseau fini.....   | 42 |
| Fig. 4.4 - Illustration du concept d'interférométrie intégré .....  | 44 |
| Fig. 4.5 - Parcours et transferts d'énergie entre l'onde incidente et les modes plasmons.....                               | 45 |
| Fig. 4.6 - Architecture de simulation d'une cavité plasmonique interférométrique .....                                      | 47 |
| Fig. 4.7 - Longueur de la cavité et réponse spectrale du système interférométrique.....                                     | 48 |
| Fig. 4.8 - Effet microscopique de la longueur de la cavité .....  | 49 |

|  |    |
|--|----|
| Fig. 4.9 - Topologie de la fonction d'indice de réfraction .....   | 50 |
| Fig. 4.10 - Réponse spectrale de l'interféromètre au changement d'indice.....  | 52 |
| Fig. 4.11 - Réponse spectrale et longueur de cavité .....  | 53 |
| Fig. 4.12 - Réponse spectrale à énergie fixe .....   | 53 |
| Fig. 4.13 - Sensibilité de l'interféromètre avec la longueur d'onde.....   | 55 |
| Fig. 4.14 - Distribution spatiale de l'indice de réfraction.....   | 59 |
| Fig. 4.15 - Déplacement de la résonance plasmon d'un réseau fini et d'une architecture interférométrique.....                | 59 |
| Fig. 4.16 - Déplacement de la relation de dispersion des plasmons de surface avec un changement d'indice de réfraction ..... | 61 |
| Fig. 4.17 - Facteur de qualité et résonance d'une infinité de systèmes interférométriques .....                              | 63 |





# Introduction

## *Diagnostic et biodétection*

Imagerie par résonance magnétique, tomographie par émission de positrons, analyses de sang, cultures bactériennes, photographie au rayon X, électroencéphalographie ; ce ne sont là que quelques exemples d'examens qui sont primordiaux dans la médecine moderne. Les médecins se servent de ces examens et tests pour établir des diagnostics fiables. Plus un médecin dispose d'informations précises et variées, mieux celui-ci va être en mesure de cerner la condition réelle du patient et d'établir le diagnostic adéquat.

Toutefois, ces informations ont un prix. Ce prix se représente en temps passé à faire les examens et à attendre les résultats, en efforts déployés par le patient et le personnel médical et évidemment en argent, déboursé pour acheter, maintenir ou opérer le matériel nécessaire à chacun de ces examens. Parfois, les patients ne peuvent se permettre d'attendre ou les hôpitaux, se permettre de payer les équipements requis. C'est pourquoi seuls certains hôpitaux sont équipés d'équipements spécialisés tels que l'IRM ou le TEP. Il est facile d'imaginer l'absence de services plus simples encore mais qui requiert du personnel spécialisé ou des locaux adéquats ; une anesthésie requiert un anesthésiste professionnel, les analyses de sang requièrent non seulement un laboratoire mais aussi le personnel qualifié qui s'y rattache. Dans les centres de services locaux, la majorité des examens plus élaborés y sont souvent absents ; les médecins y font appels au besoin, en dirigeant les patients vers des centres de services régionaux, des centres plus importants.

Les médecins doivent considérer constamment l'information dont ils ont besoin pour poser un diagnostic et le prix que cette information représente, en argent, effort ou temps.

## *Accessibilité et intégration*

Pour illustrer ce problème d'accès aux technologies de pointes, prenons l'exemple de la résonance de plasmon de surface (SPR). Cette technique permet de suivre en temps réel des interactions moléculaires sans marqueurs [1] ; elle permet aussi de déterminer de façon précise la concentration de biomolécules dans une solution. Cette technologie est commercialement disponible depuis 1990 [2] et est grandement utilisée dans la recherche [3, 4]. Toutefois, malgré l'utilité que pourraient avoir ces appareils dans le milieu médical, ceux-ci sont généralement très volumineux, ne présentent pas une fiabilité suffisante ou sont trop coûteux, ce qui réduit grandement leur usage ou limite celui-ci

aux grands centres médicaux ; c'est pourquoi les techniques traditionnelles sont encore fortement utilisées, malgré leurs limites et restrictions.

Ces appareils peuvent entre autres être utilisés pour faire de la biodétection ; toutefois, comme ils sont peu accessibles, les bénéfices de cette technologie ne se font pas sentir chez la majorité de la population. La recherche est présentement en cours pour développer cette plateforme technologique et la rendre grandement accessible [5]. Lepage et Dubowski ([6, 7]) présentent une approche où, au lieu de directement miniaturiser l'architecture classique des appareils à SPR, ils utilisent directement des concepts de photonique et de plasmonique pour créer un appareil complètement "intégré", un appareil qui pourrait être complètement microfabriqué, au même titre qu'un microprocesseur ou une puce de mémoire *flash*.

Les objectifs finaux de tels projets sont de pouvoir produire la fonctionnalité d'un appareil de SPR dans une taille et un prix très accessible et ne requérant pas de personnel qualifié pour en faire usage. Il permettrait à cette technologie d'être utilisée dans tous les points de services médicaux, sur le terrain (e.g. les cliniques de vaccinations) ou même à la maison. Les médecins auraient donc à leur disposition un outil supplémentaire leur permettant d'établir leur diagnostic plus rapidement, et plus précisément.

### *Sensibilité et interférométrie*

Les très grandes sensibilités expérimentales obtenues pour la SPR ([8-12]) sont atteintes grâce à des dispositifs élaborés de mesures optiques ; l'ensemble de ces instruments requiert espace et alignement de précision afin de fournir cette sensibilité exceptionnelle. Toutefois, ce prérequis d'équipements extensifs va à l'encontre de l'objectif de produire une architecture SPR intégrée.

Afin d'augmenter l'efficacité d'une telle architecture intégrée de détection basée sur la SPR, une nouvelle approche de mesure est proposée dans ce mémoire, qui consiste à faire l'intégration d'une mesure interférométrique auto-référencée à même l'architecture intégrée. Cette nouvelle méthode permet la possibilité de faire une mesure en phase en addition à la mesure classique, permettant ainsi l'augmentation de la sensibilité d'une architecture intégrée via la diversité des méthodes de mesures disponibles et la corrélation de ces mesures entre elles.

### *Détail de la recherche*

Ce document se structure en quatre chapitres, dont chacun soutient un rôle précis dans la présentation de cette mesure interférométrique intégrée.

Le premier chapitre se veut en première partie le lieu d'une exposition des facteurs qui entrent en jeu dans la biodétection et une introduction des concepts reliés à celle-ci. Ce chapitre est aussi composé en deuxième partie d'un récapitulatif des concepts de base en lien avec la résonance des plasmons de surface, nécessaire à la compréhension des effets observés et utilisés dans l'intégration de l'interféromètre.

Puisque les méthodes employées pour élaborer et vérifier de façon préliminaire la proposition de cet interféromètre intégré sont centrées sur la simulation numérique par éléments finis (FEM), il est évidemment nécessaire de vérifier la validité des outils de simulation employés. C'est pourquoi ce second chapitre se concentre à effectuer cette vérification de façon exhaustive, en reproduisant des résultats analytiques de la théorie des champs électromagnétiques, autant pour des expériences simples classiques que pour des variantes plus complexes et subtiles.

Après cette vérification fondamentale des outils utilisés, le troisième chapitre élabore la méthodologie de simulation employée afin d'émuler les conditions expérimentales voulues et adéquates aux analyses.

Finalement, le dernier chapitre aborde le cœur du sujet, c'est-à-dire l'intégration d'un interféromètre à la surface d'une structure SPR. Tout d'abord, une revue des notions d'interférométrie est effectuée, afin de mettre en évidence ses éléments constitutifs fondamentaux et leur rôle respectif ; ces éléments sont par la suite transposés dans l'architecture intégrée.

L'architecture interférométrique intégrée est ensuite analysée complètement sous deux régimes d'opération, correspondant à deux cas de figure possibles d'une expérience de biodétection. Le chapitre se termine ensuite avec un bilan de l'architecture intégrée et de son utilité par rapport à la biodétection.



# Chapitre 1 – Concepts de base

## 1.1 – Concepts de biodétection

Dans le but de mieux comprendre les implications du développement d'un biodétecteur fiable, il est important de pouvoir observer de façon abstraite la fonction de chacune de ses parties afin de bien identifier leur importance et leur rôle respectif.

Comme la concentration d'un composé chimique n'est pas une propriété intrinsèque de la matière, il est très ardu d'effectuer une mesure directe de la concentration de ce composé dans une solution. Pour ce faire, il est nécessaire d'employer des moyens indirects. Citons la contribution de Brian T. Cunningham à l'ouvrage [1], qui donne une excellente formulation du problème de la biodétection et de sa solution.

*« The transducer alone, however, is not sufficiently intelligent to specifically identify material placed on its surface. [...] To use a transducer as a biosensor, the surface of the transducer must have the ability to selectively attach specific material from a test sample while not allowing undesired material to attach. Selective detection capability is provided through the attachment of a layer of receptor molecules to the surface of the transducer. »*

*Brian T. Cunningham – Chapitre 1, [1]*

En faisant la conceptualisation du fonctionnement général d'un biodétecteur, il en ressort que celui-ci est généralement basé sur l'union de deux parties primaires, un transducteur physique et une couche de fonctionnalisation. Cependant, un transducteur est par définition « un dispositif qui assure la transformation d'une grandeur physique en une autre » [13]. Bien que ce dernier puisse caractériser partiellement un échantillon, il doit pour ce faire être utilisé dans un environnement contrôlé ou dans des conditions connues. Afin de rendre ce transducteur "intelligent", il est possible d'y ajouter la couche de fonctionnalisation, qui agira à titre de transducteur de reconnaissance.

Dans l'approche proposée, la mesure finale de concentration est le résultat de ces deux transducteurs. Le premier caractérise une propriété physique d'un matériau, telle la masse, la densité ou l'indice de réfraction. Le second transducteur caractérise le type des particules qui interagissent avec le premier transducteur. Cette combinaison de "mesures" permet de relier une mesure physique indirecte à une concentration, ce qui nous donne conceptuellement un biodétecteur.

### 1.1.1 – Mesure de propriétés physiques

La lumière est souvent utilisée pour mesurer les propriétés physiques des matériaux. Un laser peut par exemple mesurer très précisément une distance ou même la température d'un objet. Une onde électromagnétique passant à travers un matériau peut mesurer sa densité optique, son indice de réfraction.

En utilisant une lumière confinée dans un mode d'une cavité optique ou d'un guide, il est possible de limiter l'exposition de cette dernière au matériau à mesurer, et ainsi de s'affranchir de diverses sources de bruits. Par exemple, ce confinement permet de limiter l'extension modale de champ électromagnétique (EM) à typiquement quelques centaines de nanomètres, et ainsi d'exclure de la mesure la contribution des matières en suspension dans la solution à analyser. De plus, la sensibilité de la mesure va être proportionnelle à la fraction d'énergie du mode en contact avec la zone d'intérêt. Plus la fraction d'énergie du mode optique en contact avec la solution à analyser est importante, plus le mode sera affecté par un changement dans les paramètres de celle-ci. L'image {1.1} illustre les différentes approches possibles pour effectuer une mesure optique.

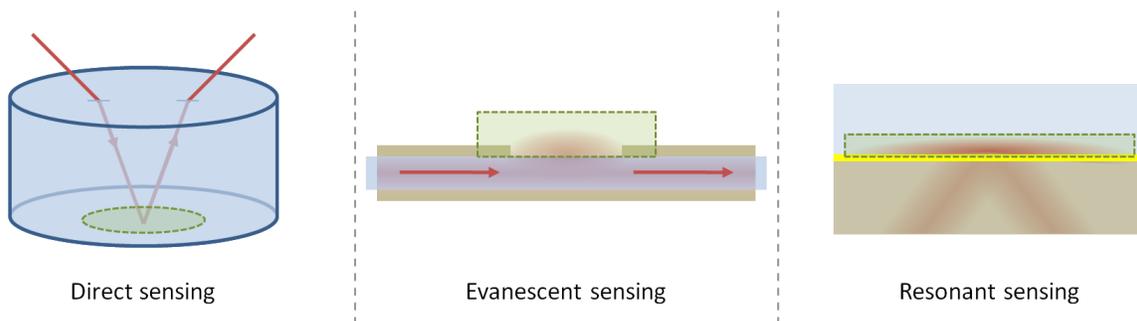


Fig. 1.1 - L'image ci-dessus présente trois différentes façons d'effectuer une mesure optique d'une interaction surfacique. Le rayon de la situation A est influencé par le volume de la solution si celui-ci change pendant la réaction. La solution B circonscrit cette influence en utilisant un mode optique guidé dont seule la surface sensible est utilisée pour effectuer la mesure. Dans la situation C, le rayon d'excitation n'est pas affecté par les conditions environnementales outre que par les conditions de surface du métal ; de plus, une partie importante de l'énergie du mode est confinée à l'interface du métal et de la solution, conférant ainsi une sensibilité exceptionnelle à la technique.

La résonance de plasmon de surface permet de mesurer très précisément l'indice de réfraction d'un matériau à la surface d'un métal. Le champ électromagnétique associé aux plasmons de surface est un champ très fortement confiné à la surface du métal, ce qui en fait un excellent candidat pour une mesure d'un phénomène surfacique. L'avantage majeur de cette technique réside toutefois dans le fait que l'observable est un phénomène résonant. Les conditions expérimentales de mesures n'ont

pratiquement pas d'influence sur la résonance. Cette dernière n'est sensible qu'aux conditions de l'interface. Une interprétation physique des plasmons de surface de même que le concept de SPR seront présentés en détail dans la section [1.2].

### 1.1.2 – Couches de fonctionnalisation biologique

Pour être en mesure de déterminer la concentration d'une cible particulière (e.g. molécule, virus ou même bactérie) dans une solution, il faut tout d'abord être en mesure de connaître un complément, une seconde molécule ou complexe qui va réagir à la première de façon spécifique; cette cible et ce complément ne réagiront qu'entre eux, et seront inactifs à la présence d'autres composés chimiques. Cette propriété du complément de n'être réactif qu'envers une cible très précise se nomme la spécificité chimique.

Un exemple très connu de compléments s'avère être les anticorps ; ceux-ci réagissent très fortement à un ou plusieurs composés chimiques (dans ce cas-ci, des virus ou bactéries). Ainsi, pour un virus précis, disons l'influenza A H1N1, il est possible d'obtenir des anticorps spécifiques à cette souche.

De la même façon, les acides nucléiques disposent tous de compléments quasi parfaitement spécifiques. Un exemple idéal est une double chaîne d'ADN (acide désoxyribonucléique) ; en séparant celle-ci, on obtient une chaîne cible et son complément. Une chaîne d'acide nucléique étant composée d'une séquence précise de nucléotides, il est possible de produire un complément en utilisant la séquence de nucléotides conjugués (cf. acides nucléiques, [14]).

Pour mesurer la concentration d'une cible dans une solution, son complément peut entre autres être utilisé comme marqueurs et comme pièges. Par exemple, une couche d'anticorps peut être créée sur une surface ; cette surface est ensuite exposée à la solution contenant le virus cible, puis rincée avec un solvant non dommageable pour les anticorps ou la cible. Sur la surface se trouvent maintenant une couche d'anticorps et une certaine quantité de virus liés aux anticorps. En exposant cette surface à un marqueur fluorescent (celui-ci est composé d'anticorps attachés à des fluorophores, des molécules fluorescentes), il est possible de déterminer la concentration de virus présent dans la solution initiale (cf. microscopie par fluorescence, [14]).

Cette action de créer une couche de compléments sur une surface dans le but de piéger une cible précise est appelée biofonctionnalisation.

Le lecteur est référé aux travaux suivants ([15]) pour les détails expérimentaux de biofonctionnalisation.

### 1.1.3 – Biodétection

La propriété d'une cible et de son complément à se reconnaître forme une des parties fondamentales de la biodétection. Conceptuellement, puisque seules les molécules cibles se trouvent immobilisées à la surface, une variation d'indice de réfraction (la mesure du second transducteur) signifie un changement de concentration de la cible à la surface. Ce changement peut résulter d'un processus dynamique (adsorption/désorption) ou simplement d'une variation en concentration dans le volume de la solution.

Dans le but de pouvoir tirer parti de la biofonctionnalisation, il est nécessaire de restreindre la mesure optique uniquement à la zone biofonctionnalisée ; les mesures par champs évanescents répondent à ce critère essentiel. Cependant, la résonance de plasmon de surface présente un confinement de champ à l'interface métal-diélectrique beaucoup plus grand que ce qui est généralement atteignable de façon pratique avec un mode optique conventionnel. De plus, l'effet de résonance et les conditions expérimentales permettent de suivre le déplacement de la résonance, ce qui en fait une technique optique idéale pour suivre en temps réel un changement d'indice de réfraction.

Jusqu'à présent, seuls les transducteurs optiques ont été examinés pour effectuer la mesure de la quantité physique, a posteriori associée à la concentration. Il est intéressant de noter que le transducteur optique pourrait aisément être remplacé par un transducteur alternatif, tant que ce dernier répond au même critère, qui est ici le confinement de la mesure physique près d'une interface biofonctionnalisée. En effet, d'autres avenues de recherche explorent ces transducteurs alternatifs pour un usage en biodétection ; les ondes acoustiques de surface (SAW) caractérisent la densité du milieu adjacent à l'interface [16, 17] et les fréquences de résonance de micro-poutres en porte-à-faux caractérisent la masse qu'elles *portent* [18].

L'utilité de conceptualiser la biodétection et les biodétecteurs en leurs constituants fondamentaux est d'offrir la possibilité d'observer le rôle de chaque composante et d'analyser leurs interactions et les restrictions qu'ils posent.

### 1.1.4 – Fiabilité et orthogonalité

Cette capacité d'unir des transducteurs différents peut être utilisée avec un objectif plus large que le but d'obtenir la mesure d'une quantité précise. En unissant plusieurs types différents de transducteurs physiques, il est possible d'obtenir une mesure de fiabilité. Comme chaque transducteur physique peut être uni à un transducteur de reconnaissance, chacun de ces "couples", de ces biodétecteurs, devrait donner la même mesure de concentration s'ils sont soumis à la même solution. Le fait de combiner ces différentes méthodes de mesure permet de déterminer si la réponse du biodétecteur est le résultat d'un faux-positif, ou de déterminer quantitativement la fiabilité de la mesure de concentration produite. **La mesure de la concentration avec ces différentes quantités physiques sert de contre-vérification systémique intrinsèque.**

Toutefois, il est possible d'aller même encore plus loin que cette combinaison linéaire de biodétecteurs. En combinant non seulement de multiples transducteurs physiques mais aussi de multiples transducteurs de reconnaissance, la détection non prédéterminée et fiable de multiple composé pourrait être effectuée.

Le lecteur est invité à consulter la dissertation suivante traitant des propriétés d'orthogonalité appliquées à la biodétection [19].

## 1.2 – Résonance de plasmon de surface

Dans les conditions normales d'illumination d'une surface métallique, la lumière va être soit réfléchie, absorbée ou transmise (dans le cas d'une couche suffisamment mince de métal). Toutefois, dans des conditions spéciales (traitée dans les prochains paragraphes), l'onde électromagnétique va entrer en résonance avec les électrons libres à la surface du métal pour produire une onde électronique longitudinale (analogue à une onde "sonore")[20]. Ce couplage transfère l'énergie de l'onde incidente vers une ondulation cohérente des électrons libres, ondulation qui est ensuite graduellement transformée en chaleur (i.e. absorbée par le métal [20]). Ces plasmons de surface sont très sensibles aux matériaux adjacents aux interfaces de cette couche, de même qu'aux conditions physiques des interfaces, telle la rugosité.

### 1.2.1 – Nature intrinsèque des plasmons de surface

De façon plus précise, un plasmon est une quasi-particule, une excitation collective des électrons libres dans un métal. Cette excitation prend la forme d'une onde longitudinale de la densité électronique, directement associable à une onde sonore, comme mentionné plus tôt.

Or, dans le cas d'une interface entre un métal et un diélectrique (deux matériaux différents), la divergence dans les densités des porteurs libres des deux matériaux permet la création d'ondes de surface, dans ce cas-ci les plasmons de surface (SP). L'excitation est toujours une onde longitudinale, mais cette fois-ci, elle est associable à une onde de gravité telle que décrite par la mécanique des fluides (cf. ondes de surface sous "mécanique des fluides" et phénomènes de surface, [14]). Cette onde de surface est caractérisée par une relation de dispersion, reliant son vecteur d'onde à son énergie. Dans le cas des plasmons de surface, la forte densité de charges libres dans le métal ralentit la progression de l'onde de surface. La pente de la relation de dispersion des plasmons de surface est donc plus faible que celle décrivant l'onde dans le diélectrique, à toutes les énergies. Le vecteur d'onde des plasmons de surface est ainsi toujours plus grand que celui d'une onde dans le diélectrique. Le calcul de cette relation de dispersion est possible à effectuer analytiquement pour un cas simple. Ce calcul sera effectué dans la section [2.3.1] à partir des équations de Maxwell. Cette relation de dispersion et les caractéristiques mathématiques qui s'y rattachent sont évidemment très sensibles aux densités électroniques des deux matériaux formant l'interface, densités décrites par les constantes diélectriques des deux milieux.

Le phénomène de résonance des plasmons de surface (SPR) émerge lorsqu'un champ électromagnétique (EM) se couple fortement avec ces plasmons de surface. En somme, le champ EM incident induit un mouvement dans les charges libres, mouvement qui à son tour induit un champ EM. Or, dans le cas où à une fréquence précise ces champs correspondent et interfèrent constructivement, un couplage se produit ; l'énergie du champ incident est fortement transférée aux plasmons de surface. La prochaine section décrit de façon plus formelle et détaillée ce processus.

Il est important d'ajouter toutefois que de par sa nature d'onde de surface longitudinale, uniquement un champ EM polarisé  $TM^1$  peut exciter un plasmon de surface ; le champ électrique perpendiculaire à l'interface est nécessaire pour produire des changements de densités de surface des électrons libres du métal. Ceci dit, le reste du mémoire traite de facto de champs incidents polarisés  $TM$ .

---

<sup>1</sup> De *transmagnetic*, signifiant que le champ magnétique est perpendiculaire au plan d'incidence ; aussi appelé polarisation "p".

### 1.2.2 – Méthodes de couplage

Pour produire un couplage entre une onde incidente et un plasmon de surface, il faut que les deux aient le même vecteur d'onde **le long de l'interface**, i.e. à la même fréquence, leur longueur d'onde projetée respective doit correspondre. Il existe deux méthodes largement utilisées pour produire un couplage photon / plasmon de surface ; le couplage par ondes évanescentes et le couplage par diffraction. Afin d'élaborer sur ces méthodes, il est d'abord nécessaire de faire une courte révision sur les conséquences des équations de Maxwell aux interfaces.

#### *Conditions aux interfaces et ondes évanescentes*

Selon la théorie électromagnétique (EM) des champs, à l'interface entre deux matériaux, certaines conditions doivent être respectées afin que l'onde puisse être correctement exprimée d'un milieu à l'autre ; ce sont les conditions aux interfaces (voir [21], chapitre 4.6). Une de ces conditions est la continuité des champs électromagnétiques tangentiels à l'interface. Pour que cette condition de continuité soit respectée, les vecteurs d'ondes projetés le long de l'interface doivent être identiques ( $k_{Ix} = k_{Tx} = k_{Rx}$ )<sup>2</sup>. Comme chaque milieu possède son propre vecteur d'onde ( $k_i = n_i \cdot k_0$ ), la composante perpendiculaire ( $k_{Ty}$ ) du vecteur d'onde dans un diélectrique à indice plus élevé sera plus grande, par conservation de la quantité de mouvement ; ceci explique la réfraction.

Inversement, lorsque le second diélectrique possède un indice de réfraction plus faible ( $n_I > n_T \therefore k_I > k_T$ ) et que la composante tangentielle du vecteur d'onde incident ( $k_{Ix}$ ) devient plus grande que le vecteur d'onde naturel du second milieu ( $k_{Ix} = k_{Tx} > k_T$ ), la composante perpendiculaire de ce vecteur d'onde devient entièrement imaginaire ( $k_{Ty} \in \mathbb{C}$  et  $\Re(k_{Ty}) = 0$ ), signifiant que l'onde EM dans le second diélectrique décroît exponentiellement en s'éloignant de l'interface ; c'est l'**onde évanescente**. Cette onde évanescente résulte de l'impossibilité à l'onde incidente de transmettre son énergie à une onde transmise, puisqu'aucune onde transmise non-confinée ne peut respecter la condition de continuité. La représentation de ces relations sur un graphique de l'énergie en fonction du vecteur d'onde projeté  $E(k_x)$  s'appelle relation de dispersion. La figure {1.2} illustre les relations

<sup>2</sup> La convention utilisée pour les symboles est la suivante. Les indices  $I, T$  et  $R$  signifie respectivement les quantités associées à l'onde incidente, transmise et réfléchi. L'indice  $i$  signifie un milieu quelconque  $i$  ; l'équation évoquée est donc valide pour tous les milieux. L'indice 0 signifie une quantité "dans le vide", indépendante du milieu (e.g.  $c_0$ , la vitesse de la lumière dans le vide). L'indice  $x$  ou  $y$  signifie respectivement une projection de la quantité vectorielle selon l'interface ou la normale à l'interface, dans le plan d'incidence ( $z$  est orthogonal au plan d'incidence). Les quantités  $E, \omega, \mathbf{k}$  et  $\lambda$  correspondent respectivement à l'énergie de l'onde ( $E = \hbar\omega$ ), sa fréquence angulaire ( $\omega = c \cdot k$ ), son vecteur d'onde ( $k = 2\pi/\lambda$  ;  $k_i^2 = k_{xi}^2 + k_{yi}^2$ ) et sa longueur d'onde.

de dispersion de différents angles d'incidence dans une architecture de réflexion totale interne ( $n_I > n_T$ ). Les lignes de lumières illustrées correspondent au vecteur d'onde naturel du milieu ( $k_i = n_i \cdot k_0$ ). Ces lignes de lumières délimitent chacune un cône de lumière, qui correspond aux différentes projections du vecteur d'onde sur l'interface, pour différents angles ( $k_{ix} = k_i \sin \theta_i$ ).

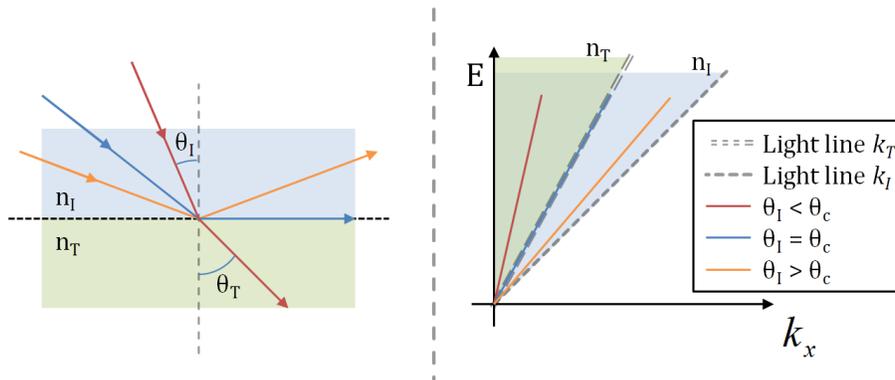


Fig. 1.2 - À gauche est illustré le schéma d'une architecture TIR ( $n_I > n_T$ ), où  $x$  représente la dimension le long de l'interface et  $y$  la dimension orthogonale à l'interface ; la relation de dispersion du système est illustrée à droite. Les lignes grisées indiquent les lignes de lumières pour les deux matériaux, où la ligne double est la ligne de lumière du matériau de plus faible indice de réfraction ( $n_T$ ) ; les zones définies par ces lignes correspondent aux différents angles d'incidence possibles pour chaque matériau (de 0 à 90 degrés). Une fois passée la ligne de la lumière, l'onde devient évanescente pour ce milieu. Dans le schéma précédent, la ligne orange est passée la ligne de la lumière du milieu T, ce qui indique que la lumière ne peut s'y propager.

Au même titre qu'il est nécessaire de respecter les conditions aux interfaces afin de coupler une onde incidente à une onde transmise entre deux diélectriques, il est nécessaire de respecter ces conditions pour coupler une onde incidente à un plasmon de surface.

### Couplage par ondes évanescentes

Le plasmon de surface à une interface semi-infinie métal-diélectrique possède un vecteur d'onde plus grand que celui de la lumière dans ce diélectrique (voir section [1.2.1]). La courbe de dispersion des plasmons dans ce couple métal-diélectrique se trouve donc à droite de la ligne de la lumière, signifiant un interdit de couplage direct (voir fig. {1.3}) ; ceci est vrai pour tous couples métal-diélectrique. Cet interdit provient du fait que peu importe l'angle d'incidence, le vecteur d'onde projeté de la lumière incidente sera toujours plus petit ou égal au vecteur d'onde incident non-projeté ( $k_{ix} \leq k_I$ ), et celui-ci étant plus petit que le vecteur d'onde des plasmons de surface, le couplage est impossible.

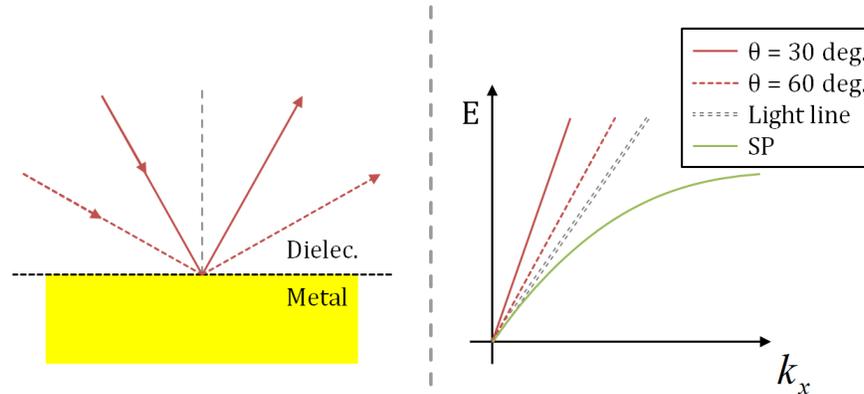


Fig. 1.3 - Les courbes de dispersion qualitative de la lumière dans un diélectrique d'une interface métal-diélectrique, en fonction de leur vecteur d'onde **projeté** par rapport à l'interface. La ligne en pointillé représente la relation de dispersion naturelle de la lumière dans le diélectrique (ligne de la lumière ; cf. "light line"), alors que la courbe représente la relation de dispersion des plasmons de surface pour cette interface.

Dans une architecture où deux diélectriques différents sont présents ( $n_I > n_T$ ), il est possible de générer une onde évanescente caractérisée par un vecteur d'onde plus grand que le vecteur d'onde naturel du milieu transmis ( $k_{Ix} > k_T$ ). En mettant cette onde évanescente en contact avec une interface entre un métal et le diélectrique du milieu transmis, ce vecteur d'onde de l'onde évanescente peut être suffisamment grand pour se coupler aux plasmons de surface de l'interface.

C'est de cette façon que l'on produit un couplage par onde évanescente. Un exemple d'une telle architecture consiste à utiliser une couche mince de métal (typiquement de 25 à 50nm d'épaisseur) entre deux diélectriques. Une onde provenant du diélectrique incident va en partie transmettre à travers cette couche de métal et réfracter naturellement dans le diélectrique de transmission, suivant la loi de Snell-Descartes. En augmentant l'angle d'incidence, la réflexion totale interne sera atteinte, produisant une onde évanescente dans le diélectrique de transmission. Au-delà de l'angle critique (l'angle de TIR), la projection du vecteur d'onde ( $k_{Ix} = k_{Tx} = k_x$ ) continuera d'augmenter de sorte que l'on pourra trouver une condition de couplage (à énergie fixe) vers un mode plasmon de surface. La conceptualisation de cette procédure est illustrée à la figure {1.4}.

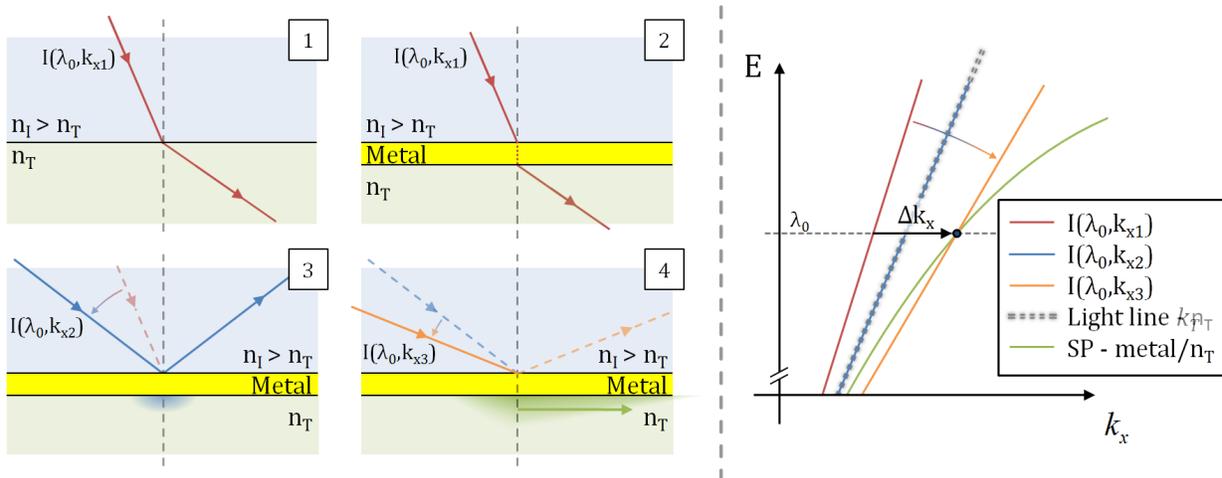


Fig. 1.4 - Procédure conceptuelle pour illustrer le couplage évanescent. La situation 1 illustre la réfraction d'une onde incidente d'un milieu d'indice plus élevé vers un milieu d'indice plus faible. L'ajout d'une couche mince de métal ne modifie pas l'angle de sortie dans le milieu d'indice  $n_T$  (illustré dans l'encadré 2). L'augmentation de l'angle d'incidence (le vecteur d'onde projeté) jusqu'à l'angle critique provoque la réflexion totale interne (TIR) et la création d'une onde évanescente dans le milieu d'indice  $n_T$  (encadré 3). L'augmentation de l'angle d'incidence au-delà de l'angle critique aura pour effet que le vecteur d'onde projeté de l'onde évanescente atteindra le vecteur d'onde des plasmons de surface, permettant ainsi le couplage (encadré 4). Ce couplage est illustré sur le graphique des relations de dispersion, à droite ; pour une énergie fixe ( $\lambda_0$ ), le changement d'angle correspond à l'augmentation du vecteur d'onde projeté ( $\Delta k_x$ ) jusqu'à ce que la ligne de la lumière en déplacement croise à cette énergie la courbe de la relation de dispersion des plasmons de surface de l'interface métal/diélectrique  $n_T$ .

### Couplage par réseau

La diffraction d'un réseau est un phénomène largement connu (voir [21], chapitre 10.2.8). Une onde incidente est diffractée dans une série de directions très précises correspondant à différents ordres de diffraction. L'ordre 0 représente la transmission ou la réflexion naturelle, c'est-à-dire non diffractée, alors que les ordres supérieurs sont diffractés plus ou moins fortement en fonction des paramètres du réseau. Plus la période du réseau est courte, plus les différents modes de diffraction sont angulairement séparés.

Dans l'espace réciproque, il est possible d'associer la périodicité d'un réseau à un vecteur d'onde. Pour calculer les ordres de diffraction dans cet espace réciproque (en fonction des vecteurs d'ondes), il suffit d'ajouter ou de soustraire des entiers de ce vecteur d'onde de réseau au vecteur d'onde projeté de l'onde incidente. Ceci se représente aisément sur le schéma de relation de dispersion par une simple translation de la ligne de lumière, comme illustré à la figure {1.5}.

C'est cette **combinaison** de vecteurs d'onde qui permet le couplage entre une onde incidente et un plasmon de surface.

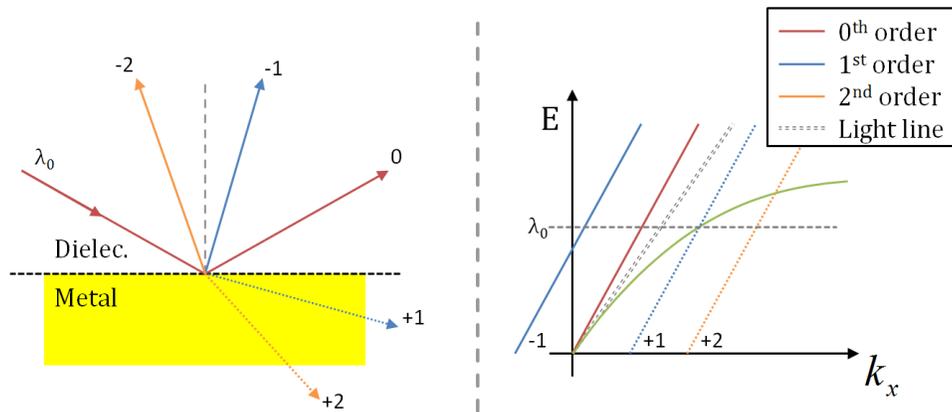


Fig. 1.5 - Courbes de dispersion qualitative de la lumière après son interaction avec un réseau (situé à l'interface ; non-représenté ici). Les différents ordres de diffraction sont représentés sur le schéma de gauche pour une longueur d'onde précise ; cette longueur d'onde est identifiée par la ligne horizontale dans le graphique de la relation de dispersion, à droite. L'effet "macroscopique" d'un réseau est de translater la relation de dispersion de la lumière incidente (représenté ici par la ligne rouge).

### 1.2.3 – Effet de résonance

L'effet de résonance émerge du transfert d'énergie entre la lumière incidente et les plasmons de surface, lorsque les conditions de couplage sont rencontrées (voir section [1.2.2]). De façon générale, la forme de la résonance présente une forme caractéristique très étroite en fonction du ou des paramètres de couplage (e.g. l'angle d'incidence). Cependant, cette forme peut être affectée entre autres par des facteurs physiques, tels que la nature des matériaux impliqués (diélectrique(s), métal) et par des facteurs géométriques, tels que la présence de microstructures à l'interface ou sa qualité (rugosité de surface, qualité et forme de réseaux).

Puisque les mesures d'indice de réfraction sont généralement faites de façon relative, la position absolue de la résonance n'est pas aussi importante que son déplacement relatif entre sa position initiale et sa nouvelle position après modification du milieu d'indice test. L'angle de couplage et l'énergie de la lumière incidente sont les paramètres de couplages les plus couramment utilisés. Chaque paramètre de couplage peut être analysé individuellement pour caractériser la forme de la résonance ou pour observer son déplacement.

## 1.3 – Outils d'expérimentation

La modélisation informatique propose une alternative rudimentaire à la fabrication et à l'expérimentation en laboratoire ; loin de remplacer la validité d'une expérience réelle, les capacités informatiques modernes permettent néanmoins aux modèles d'émuler de façon adéquate les

phénomènes physiques connus. De par sa nature virtuelle, la rapidité et l'aisance de développement de prototypes font de la modélisation une méthode de développement préliminaire de choix. Or, des différentes méthodes de modélisation, la simulation par éléments finis (FEM, *Finite Elements Method*) procure des avantages considérables. Les logiciels commerciaux sont nombreux, et ont été optimisés et testés pour les différents domaines d'applications spécifiques. La simulation FEM permet aussi le design d'architectures complètement arbitraires.

La simulation FEM est utilisée dans ce mémoire afin d'introduire le concept d'interféromètre intégré, en prévision d'une preuve de concept expérimentale.

## Chapitre 2 – Méthodologie de vérification des simulations

Dans le but de vérifier la validité des simulations, il est nécessaire de produire des résultats pouvant être comparés aux modèles physiques fondamentaux dans le cas d'expériences classiques ou aux expériences et modèles acceptés par la communauté dans le cas d'expériences plus complexes ou plus pointues.

### 2.1 – Expériences classiques

À la base, les logiciels de simulation commerciaux sont constamment vérifiés par la communauté scientifique. Toutefois, reproduire des expériences classiques permet d'effectuer des vérifications fondamentales rapidement, d'appriivoiser le logiciel et la technique de simulation utilisée, mais aussi d'identifier les limitations et restrictions de la méthode.

Dans le but de confirmer la capacité du logiciel à correctement simuler des plasmons de surface dans des architectures complexes, il est d'abord nécessaire de confirmer la véracité des simulations dans des cas simples. Les phénomènes de bases sont d'abord explorés, telles la réfraction et la réflexion totale interne, avant de passer au couplage des plasmons par onde évanescente. Les détails des simulations sont donnés en annexe A.

#### 2.1.1 – Architecture de réfraction simple

Lorsque la lumière traverse l'interface entre deux diélectriques, celle-ci va être réfractée. Le phénomène de réfraction est fondamental en optique (voir [21], chapitre 4.4). Pour vérifier ce principe, une simulation très simple a été utilisée (détails dans la section [A.2.1]).

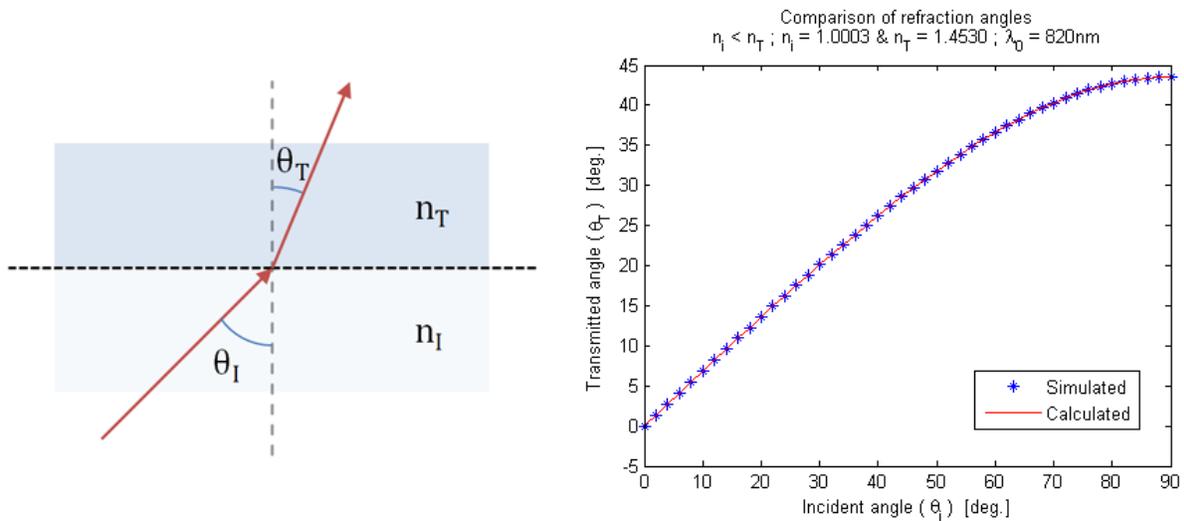


Fig. 2.1 - À gauche est représentée l'architecture simulée : une interface plane entre deux domaines diélectriques. Le graphique illustre la relation entre l'angle d'incidence et l'angle transmis (loi de Snell-Descartes).

La relation entre l'angle d'incidence et l'angle de transmission est effectuée, dans le but de vérifier la corrélation avec la loi de Snell-Descartes. L'angle de transmission est mesuré dans la simulation via le calcul du vecteur de Poynting à partir de la topologie des champs obtenus (cf. vecteur de Poynting, [14]). Comme observée sur le graphique précédent, la corrélation est de 0.9999, représentant une erreur relative de moins de 0.01%, d'origine numérique. Naturellement, la corrélation supplémentaire des mesures classiques de T et R (les coefficients de Fresnel, pour la transmission et la réflexion, respectivement) est souhaitable. Toutefois, de par les limitations inhérentes de la simulation FEM (émulation d'un domaine infini par des conditions aux frontières), il est très difficile d'obtenir des courbes aussi précises pour des plages aussi larges. Des artifices de simulations sont générés dans les cas "extrêmes", tels que par exemple un angle d'incidence de 90 degrés. Les conditions aux frontières vont continuer d'émuler certaines conditions physiques pour résoudre les équations différentielles ; les résultats produits ne seront toutefois pas nécessairement cohérents avec la situation initialement voulue. Pour l'exemple d'une incidence à 90 degrés, un guidage se produit dans le milieu incident, n'émulant plus une injection de lumière mais plutôt un axe de symétrie. Ces détails ne sont toutefois pas couverts par ce document, puisqu'ils sortent du sujet d'intérêt. Le calcul précis de T et R étant donc impropre dans ces conditions, ceux-ci ne sont pas considérés.

Il est donc inadéquat de conclure immédiatement que la simulation reflète bien le comportement théorique de la réfraction entre deux diélectriques. Examinons un sous-phénomène spécifique de la réfraction : la réflexion totale interne.

### 2.1.2 – Architecture de réflexion totale interne

La réfraction de la lumière d'un milieu d'indice de réfraction élevé vers un milieu d'indice plus faible permet l'observation du phénomène de réflexion totale interne (TIR) (voir [21], chapitre 4.7), c'est-à-dire lorsque la lumière se voit réfléchie au lieu d'être réfractée. L'angle critique marque la limite. Au-delà de l'angle critique, une onde évanescente est observée dans le milieu de plus faible indice de réfraction.

L'angle critique est défini comme étant l'angle pour lequel le vecteur d'onde projeté de la lumière incidente (dans le milieu de plus fort indice) correspond au vecteur d'onde maximal de la lumière dans le milieu de plus faible indice. En termes géométriques, c'est l'angle d'incidence pour lequel la lumière réfractée sera parfaitement parallèle à l'interface (90 degrés). L'angle critique est donc fonction des indices de réfraction des deux milieux composant l'interface.

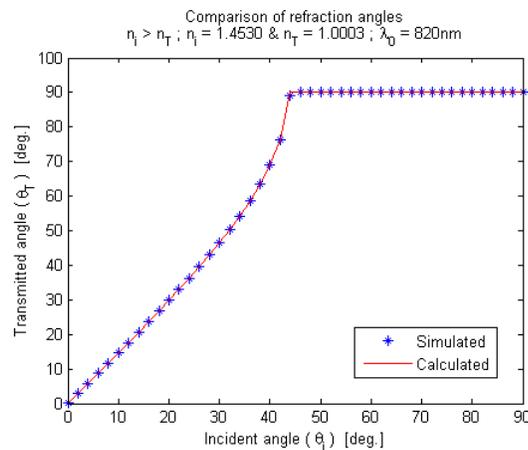


Fig. 2.2 - Observation de la réflexion totale interne et de l'angle critique.

Comme illustré à la figure {2.2}, la corrélation entre la simulation de la réfraction et le calcul via la relation de Snell-Descartes est encore très forte ; l'erreur la plus grande est d'environ 1% et se trouve localisée très près de l'angle critique. Cette erreur émerge d'un artifice de simulation dû aux conditions aux frontières, produisant un guidage artificiel dans cette condition "extrême" (cf. explication sommaire abordée dans la section précédente sur T et R, les coefficients de Fresnel). Cet artifice de simulation ne survient que très près de l'angle critique ( $\pm\delta < 1^\circ$ ) ; il n'a donc pas d'impact

sur les investigations effectuées dans ce mémoire, la résonance plasmon se trouvant suffisamment au-delà de l'angle critique.

L'architecture TIR permet de créer une onde évanescente dans le milieu de faible indice. Cette onde résulte du vecteur d'onde de la lumière qui est plus grand que celui supporté par le milieu. C'est cette propriété qui permet de coupler l'énergie du mode libre au mode confiné, de la lumière incidente aux plasmons de surface. Pour ce faire, il nous est nécessaire d'avoir notre interface métal-diélectrique soumise à l'onde évanescente.

### 2.1.3 – Interface entre deux diélectriques séparés par un métal

Les métaux agissent comme de très bons réflecteurs des ondes électromagnétiques, dus à leurs charges libres. Toutefois, une onde électromagnétique peut traverser un métal si celui-ci est suffisamment mince pour que l'onde ne soit pas totalement absorbée et réfléchi ; cette distance caractéristique est appelée épaisseur de peau ([21], chapitre 4.8). Conceptuellement, l'influence majeure de cette couche mince de métal sur l'onde transmise va être d'en diminuer sensiblement l'intensité ; en effectuant la même expérience que celle présentée précédemment (mesure de l'angle transmis vs l'angle d'incidence, sections [2.1.1] et [2.1.2]), on remarque que la présence d'une couche de métal n'affecte que la phase et l'intensité. La relation entre l'angle d'incidence et l'angle de transmission est toujours la même, par conservation du vecteur d'onde parallèle à l'interface ( $k_x$ ). Au-delà de l'angle critique, le vecteur d'onde tangentiel va atteindre un point où il sera suffisamment grand pour correspondre au vecteur d'onde des plasmons de surface, permettant ainsi un couplage entre l'onde incidente et le mode plasmon, et donc un transfert d'énergie (section [1.2.2]). Pour le cas traité à la figure {2.3}, l'angle correspondant à ce point de couplage est d'environ 45 degrés.

La figure illustre la norme du champ magnétique suivant une coupe normale à l'interface d'une architecture diélectrique-métal-diélectrique ; le champ incident a été soustrait au champ total afin de mettre en évidence l'onde transmise et l'onde réfléchi. Deux régions d'intérêt méritent une mention particulière : les champs le long de la normale à l'interface (axe z) à 60 et 45 degrés d'angle d'incidence. À 60 degrés, on observe une réflexion totale interne (TIR), où l'amplitude de l'onde transmise décroît exponentiellement en s'éloignant de l'interface et où l'onde est fortement réfléchi. À 45 degrés, on observe que l'onde n'est que très peu réfléchi, mais que l'onde transmise est caractérisée par une amplitude localisée près de la surface spécialement intense.

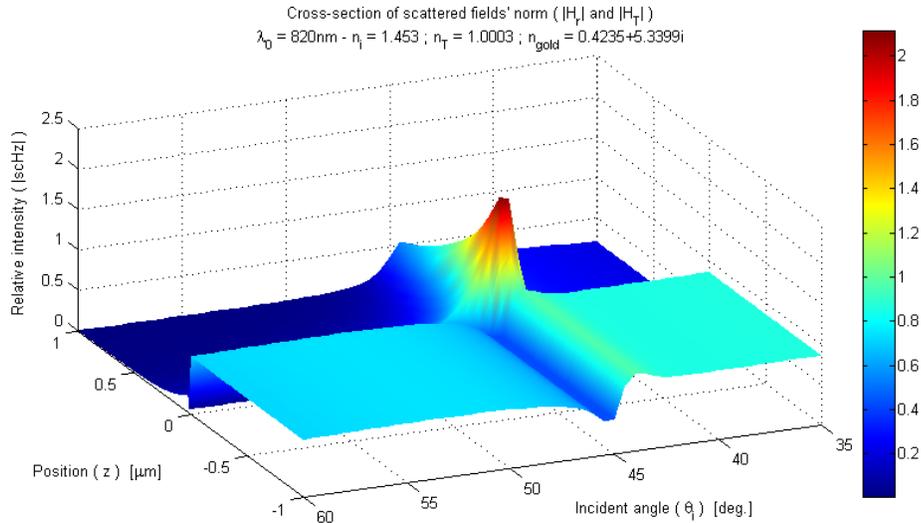


Fig. 2.3 - Norme des champs non-incidents (champs réfléchis et transmis) dans une architecture à couche mince d'or entre deux diélectriques (représenté sur l'image de gauche dans la figure {2.4}). Le champ incident utilisé est une onde plane infinie avec un angle d'incidence de  $\theta_i$  degrés situé sous la couche d'or. On remarque un mode optique à l'incidence de 45 degrés, qui sera démontré comme étant bel et bien un mode plasmon (dans les sections [2.2] et [2.3]).

La faible réflexion et la forte intensité spatialement localisée du pic sont des indications du confinement de l'énergie dans un mode optique de surface. De plus, un mode optique possède la propriété de pouvoir se propager par lui-même dans une structure, alors qu'une **onde évanescente n'est qu'une partie inhérente de la lumière incidente**, prenant une forme précise dans un milieu où il lui est impossible de se propager. Les prochaines expériences mettent l'accent sur cet aspect propagatif du mode plasmon, dans le but de confirmer hors de tout doute sa nature.

## 2.2 – Couplage lumière – plasmons de surface

### 2.2.1 – Distinction entre onde évanescente et SP

L'onde évanescente et le plasmon de surface sont tous deux caractérisés par une décroissance exponentielle de l'amplitude des champs en s'éloignant de l'interface dans le diélectrique du milieu transmis. Toutefois, l'onde évanescente est indissociable de l'onde incidente, alors que le plasmon de surface correspond à une onde propagative générée par l'onde incidente. Dans le but de distinguer les deux, il suffit d'utiliser une simulation où la lumière incidente présente un profil spatial fini, ce qui permettra d'observer la propagation du mode au-delà de la zone illuminée, dans le cas des plasmons de surface.

L'expérience consiste à éclairer seulement une partie de la structure et d'observer les différences entre un "mode" TIR (e.g. entre deux diélectriques) et un mode plasmon (e.g. supporté par une couche mince de métal entre les deux mêmes diélectriques).

Le schéma {2.4} présente les résultats de la comparaison entre les champs évanescents générés par une réflexion totale interne et les champs évanescents associés à un mode plasmonique.

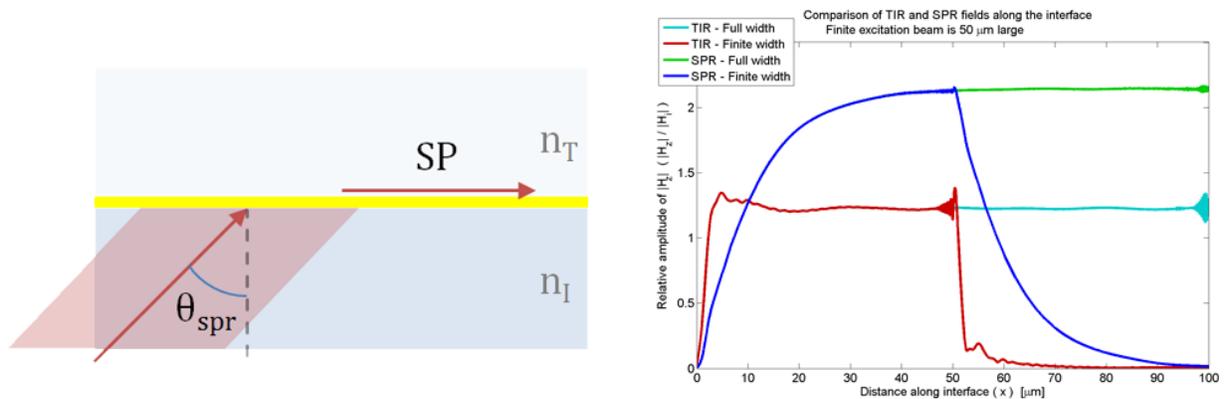


Fig. 2.4 - Couplage par ondes évanescentes de plasmons de surface (couplage Kretschmann). Afin d'obtenir une onde évanescente sans le couplage au mode plasmon, les simulations de réflexion totale interne (TIR) ont été effectuées avec la même architecture en excluant la couche mince métallique. La largeur du faisceau incident est soit de  $50\mu\text{m}$  (*Finite width*) ou de plus de  $100\mu\text{m}$  (*Full width*). Les mesures sont prises à  $150\text{nm}$  de la surface sur toute la largeur du domaine de simulation. Les irrégularités sur les courbes ont deux origines : les effets de bords causés par la finalité du faisceau incident, occasionnant de la diffraction "artificielle", de même que les réflexions sur la frontière. Ces irrégularités sont moins apparentes sur les courbes de résonance plasmon puisque la couche d'or atténue fortement l'intensité des champs "non-couplés".

On remarque d'abord que le champ évanescent relié à la réflexion totale interne est restreint à la zone illuminée de l'interface. Comme mentionné auparavant, ce champ évanescent est une partie inhérente de l'onde incidente.

Dans le cas de l'éclairement sur une zone finie, on note aussi la croissance et décroissance exponentielle du mode plasmon. Comme démontré dans le chapitre [2.3.1], ce mode est caractérisé par une absorption importante. Or, il est possible d'expliquer la croissance exponentielle de l'amplitude du mode (de forme  $C[1 - e^{-kx}]$ ) comme étant le résultat de l'accumulation des amplitudes respectives des ondes plasmons couplées en différents points le long de l'interface. Conceptuellement, les plasmons couplés au début du faisceau vont décroître exponentiellement ; par contre, ces derniers vont s'ajouter (en intensité ou par interférence constructive) aux plasmons couplés un peu plus loin vers le centre du faisceau, et ainsi de suite sur la largeur complète du faisceau incident. La somme de ces contributions à l'amplitude va former l'amplitude cumulative du

mode. La courbe d'amplitude résultante est caractéristique d'un équilibre dynamique, ici entre l'apport en énergie et la perte du mode. Pour un faisceau incident plat de largeur finie, la croissance du mode s'écrit (en ne tenant pas compte de la phase) et en utilisant  $k_x = k'_x + jk''_x$  :

$$\begin{aligned}
 E_{Total}(x) &= \int \Re e[dE_{sp}] \\
 &\propto \gamma \int_0^x e^{-k''_{sp} \cdot x'} dx' \\
 &= \frac{\gamma}{k''_{sp}} [e^{-k''_{sp} \cdot x'}]_0^x \\
 &= \frac{\gamma}{k''_{sp}} (1 - e^{-k''_{sp} \cdot x})
 \end{aligned}
 \tag{2-1}$$

La corroboration de ce résultat avec la valeur déterminée analytiquement (certaines architectures permettent le calcul analytique de la constante de propagation) est une preuve supplémentaire et nécessaire à la vérification que le mode couplé est bel et bien un mode plasmon. Cet exercice sera effectué dans le chapitre suivant (voir spécifiquement [2.3.2]).

La simulation du couplage par ondes évanescentes permet bien la génération de plasmons de surface. Toutefois, comme il sera démontré dans les chapitres [3.1 et 3.2], le couplage par ondes évanescentes présente certains inconvénients au niveau des simulations. L'expérience suivante explore une méthode alternative en couplant une lumière incidente au mode plasmon par la diffraction d'un réseau. La prochaine section observe aussi les différences entre les deux méthodes dans un contexte de simulation.

### 2.2.2 – Équivalence entre le couplage direct et le couplage par diffraction (0<sup>ème</sup> et 1<sup>er</sup> ordre)

Dans le but d'illustrer la similitude entre le couplage par ondes évanescentes et le couplage par diffraction, ces deux méthodes seront simulées et comparées quantitativement.

La simulation utilise une architecture très similaire à celle employée précédemment, lors de la démonstration de couplage par ondes évanescentes employant un profil spatial fini de faisceau incident. La première différence est l'angle d'incidence, qui est maintenant normal à l'interface. La seconde différence est la présence d'un réseau fini à la surface de la couche de métal, situé dans la zone d'illumination (voir l'encadré de la figure {2.5}). La périodicité du réseau est fixée de telle sorte

qu'au premier ordre de diffraction, le vecteur d'onde de la lumière incidente diffractée sera égal au vecteur d'onde du mode plasmon, permettant ainsi le couplage (i.e.  $k_g \cong k_{sp}$ ).

La figure suivante illustre ces deux types de couplage sur la même architecture avec réseau. Le couplage direct entre l'architecture réseau et l'architecture simple est aussi présenté. Les plasmons de surface couplés par la diffraction du réseau se propagent de la même façon que ceux couplés par ondes évanescentes ; dans les deux cas, les longueurs de propagation sont identiques, et ce, à toutes les énergies simulées. On remarque cependant une différence dans l'amplitude des deux modes plasmons ; cette différence résulte du changement dans l'efficacité de couplage de l'énergie dans les modes plasmons. Le couplage direct est plus efficace pour une même irradiation que le couplage par réseau, puisque ce dernier nécessite le transfert de l'énergie par la diffraction au premier ordre. Le réseau ne diffractant pas entièrement la puissance dans le premier ordre, une partie non négligeable de l'énergie se trouve donc perdue soit dans les ordres supérieurs, soit dans la transmission (ordre 0 de diffraction). Ceci dit, il est intéressant de noter que cette efficacité de diffraction dans le 1<sup>er</sup> ordre pourrait être augmentée avec l'usage par exemple d'un réseau échelette (cf. *blazed grating*).

Comme mentionné précédemment, le couplage par diffraction présente toutefois quand même certains avantages sur le couplage par ondes évanescentes en termes de simulation. L'incidence normale du couplage par diffraction permet de créer des problèmes de diffraction complexes sans toutefois restreindre complètement l'usage des conditions de symétries ou de périodicités normalement utilisable que dans les problèmes sans diffraction ou faiblement perturbés (voir [3.3.1]). L'usage de symétrie permet de réduire la taille des simulations ou d'étendre le domaine simulé ; de la même façon, la possibilité qu'offre le couplage par réseau de coupler des plasmons sur une interface unique au lieu d'une couche mince élimine la nécessité de simuler le second diélectrique et permet la comparaison avec les solutions analytiques aux équations de Maxwell. Ces avantages font en sorte qu'il est plus intéressant d'utiliser le couplage par réseau lorsque les effets étudiés ne sont pas reliés aux méthodes de couplages, mais aux plasmons de surface eux-mêmes.

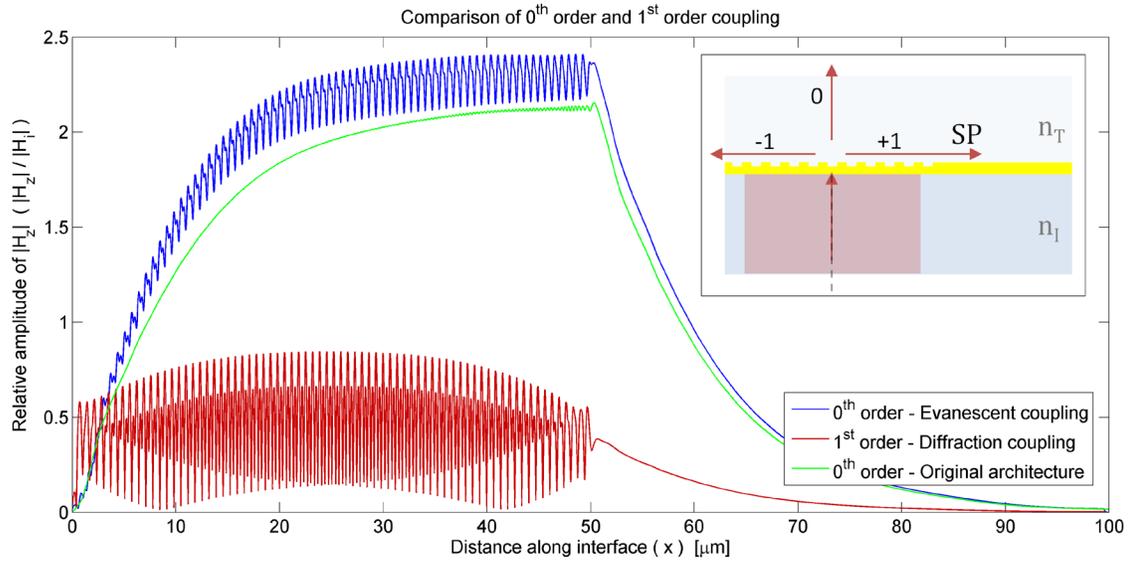


Fig. 2.5 - Comparaison entre le couplage direct (évanescent) et le couplage par diffraction. L'architecture utilisée ici est la même que la précédente (voir figure {2.4}), outre que la surface des 50 premiers micromètres de la couche mince a été modifiée pour représenter un réseau sinusoidal (voir l'annexe A pour les détails de simulation, section [A.2.3]) ; l'encadré illustre les ordres de diffraction du couplage par diffraction (au 1<sup>er</sup> ordre). La divergence légère des croissances exponentielles entre les deux couplages directs provient de la différence de longueur de propagation sur la surface avec et sans réseau ; la longueur est plus courte en présence du réseau. Les longueurs de propagation des deux modes redeviennent évidemment identiques dans la section sans réseau (sous les mêmes conditions). La différence d'intensité entre ces deux modes est en partie explicable par cette différence de longueur de propagation, mais aussi par la différence d'épaisseur effective de la couche mince de métal. Le réseau fait osciller l'épaisseur de la couche entre 35 et 50 nm, contrairement à l'épaisseur de 50 nm constante sur l'architecture sans réseau. Finalement, les modulations de la norme du champ magnétique observable "au dessus" du réseau sont entièrement causées par l'interférence des différents ordres de diffractions (voir analyse complète dans l'annexe A, section [A.3.2]). Dans le cas du couplage par diffraction, ces modulations sont plus importantes puisqu'il y a formation d'un mode stationnaire plasmon provenant des ordres  $\pm 1$  de diffraction.

## 2.3 – Vérifications des propriétés des plasmons de surfaces

Dans le but de confirmer que le mode optique observé jusqu'à présent est bien le mode plasmon, il est nécessaire de faire les comparaisons avec les définitions acceptées des plasmons de surface. Les plasmons de surface sont formellement définis comme une solution spécifique des équations de Maxwell, sous condition d'une interface métal-diélectrique. La démarche est présentée brièvement ci-dessous, de même que les caractéristiques qui en émergent ; ces dernières seront réutilisées dans la section suivante pour établir des points de comparaison entre la théorie (la solution analytique) et les simulations.

### 2.3.1 – Solution des équations de Maxwell

La solution complète et élaborée se trouve dans [20]; toutefois, un certain développement est nécessaire afin d'en avoir un aperçu et d'être en mesure de cerner les propriétés des plasmons de surface qui seront réutilisées par la suite.

Une onde plane infinie polarisée TM s'écrit comme suit pour le milieu "i", en considérant la définition d'axes suivante :  $\hat{z}$  est orthogonal au plan d'incidence,  $\hat{y}$  est orthogonal à l'interface et bien sûr  $\hat{x}$  est parallèle à la l'interface. Cette définition non-conventionnelle a été établie afin de respecter la symbolique utilisée dans le logiciel commercial sélectionné pour les simulations FEM. La même convention est employée tout au long de ce document (voir la note de bas de page, en page 11).

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{0i} \cdot e^{j(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})} \quad \{ 2-2 \}$$

$$\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{0i} \cdot e^{j(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{0i} &= E_{xi} \cdot \hat{x} + E_{yi} \cdot \hat{y} + 0 \cdot \hat{z} \\ \text{où } \mathbf{H}_{0i} &= 0 \cdot \hat{x} + 0 \cdot \hat{y} + H_{zi} \cdot \hat{z} \\ \mathbf{k}_i &= k_{xi} \cdot \hat{x} + k_{yi} \cdot \hat{y} + 0 \cdot \hat{z} \end{aligned}$$

Les relations suivantes définissent la continuité des champs à l'interface.

$$\begin{aligned} E_{x1} &= E_{x2} \\ H_{z1} &= H_{z2} \\ \epsilon_1 E_{y1} &= \epsilon_2 E_{y2} \end{aligned} \quad \{ 2-3 \}$$

Des relations de continuités, il s'ensuit que  $[k_{x1} = k_{x2} \equiv k_x]$ . On applique ensuite la démarche de solution suivante à une des équations de Maxwell pour trouver la relation entre les  $k_y$ .

$$\nabla \times \mathbf{H}_i = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}_i = \epsilon_i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}_i \quad \text{où } \epsilon_i = \epsilon_r |_i$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial H_z}{\partial y} \right|_i &= \epsilon_i j \omega E_{xi} \\ \frac{k_y}{\epsilon} H_z \Big|_1 &= \frac{k_y}{\epsilon} H_z \Big|_2 \\ \frac{k_{y1}}{\epsilon_1} &= \frac{k_{y2}}{\epsilon_2} \end{aligned} \quad \{ 2-4 \}$$

Afin de trouver la relation de dispersion retardée pour une surface, on utilise la définition de norme du vecteur d'onde dans un milieu.

$$k_i^2 = \epsilon_i \cdot k_0^2 = k_x^2 + k_{yi}^2 \quad \{2-5\}$$

En combinant les équations {2-4} et {2-5}, on obtient la relation de dispersion.

$$k_x = k_0 \left( \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^{1/2} \quad \{2-6\}$$

Pour une interface métal-diélectrique,  $k_x$  sera complexe ( $k_x = k'_x + jk''_x$ ) et plus grand que  $k_0$  pour la plage d'énergies en dessous de la fréquence plasma du métal. Dans ces conditions :

$$\begin{aligned} k_x &> \sqrt{\epsilon_i} \cdot k_0 \\ \therefore k_y &\in \mathbb{C} \text{ et } \text{Re}(k_y) = 0 \\ \text{L'intensité du champ s'exprime :} \\ I_y &= E_y \cdot \overline{E_y} \propto e^{-2|k''_y \cdot y|} \end{aligned}$$

On observe donc que l'intensité des champs décroît exponentiellement en s'éloignant de l'interface, avec une longueur caractéristique :

$$\Lambda_{decay} = \frac{1}{2k''_y}$$

Similairement, l'intensité le long de l'interface est caractérisée par la longueur de décroissance :

$$L_{decay} = \frac{1}{2k''_x} \quad \{2-7\}$$

Il est intéressant de noter par l'équation {2-5} que plus  $k_x$  est grand, plus la longueur caractéristique de décroissance en  $\hat{y}$  est courte ; le mode est donc de plus en plus confiné à l'interface.

### 2.3.2 – Calcul analytique et simulations

L'objectif de la comparaison est de déterminer quantitativement si le mode optique généré par les méthodes de couplage présentées auparavant s'avère bien être un mode plasmon. Cette détermination est effectuée en comparant le vecteur d'onde complexe du mode simulé (via FEM) avec le vecteur d'onde complexe prédit par la théorie (solution des équations de Maxwell), en

utilisant évidemment les mêmes constantes diélectriques (indices de réfraction) complexes ; ces dernières proviennent de mesures expérimentales [22, 23].

Les simulations sont effectuées sur une interface métal-diélectrique semi-infinie (Or / SiO<sub>2</sub>), dans le but de pouvoir comparer avec la solution analytique soulignée dans la section précédente [2.3.1]. L'onde incidente est couplée au mode optique grâce à un réseau de longueur finie, dont la périodicité est approximée à la longueur d'onde plasmon afin d'obtenir un couplage optimal près de l'incidence normale. Une fois le couplage effectué, le mode optique est libre de se propager le long de l'interface au-delà du réseau et de l'onde incidente. On note que la position de l'angle de couplage versus la périodicité du réseau est déjà une indication du vecteur d'onde (partie réelle) du mode optique supporté par la surface ; cette façon de procéder serait conventionnellement et expérimentalement la façon d'observer la relation de dispersion du système. Toutefois, puisque les outils nous le permettent et afin d'observer aussi la partie imaginaire du vecteur d'onde, le mode optique est observé de façon isolée, se propageant sur l'interface.

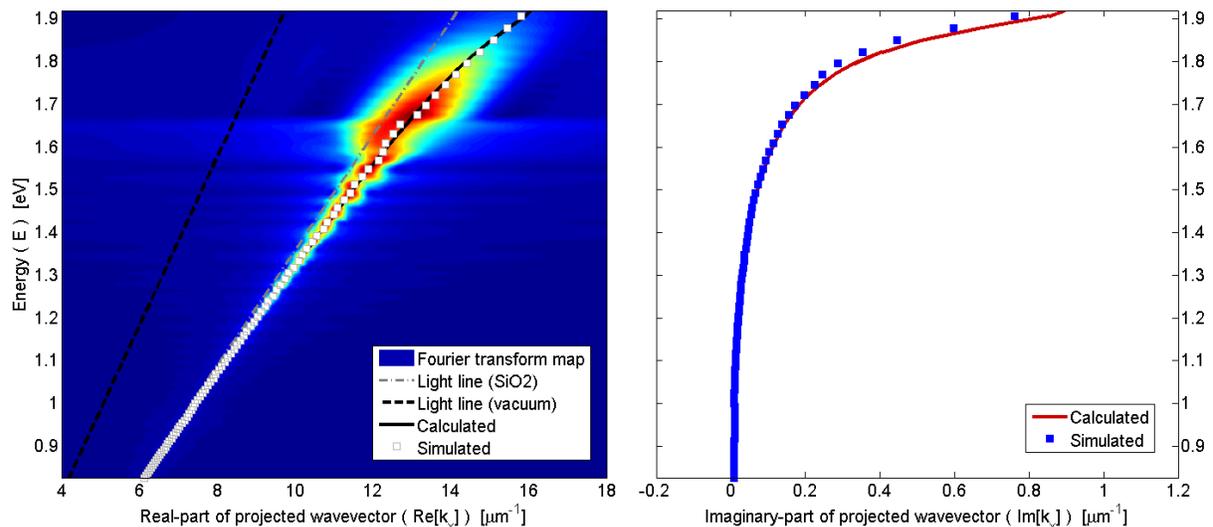


Fig. 2.6 - Étude du vecteur d'onde complexe du mode optique observé dans les simulations. À gauche se trouve la relation de dispersion, la partie réelle du vecteur d'onde complexe. À droite se trouve la partie imaginaire du vecteur d'onde, correspondant à l'inverse de la longueur de propagation (voir équation {2-7}). Les résultats simulés sont obtenus à partir de la mesure sur le champ magnétique transverse ( $H_z$ ) ; les résultats calculés sont trouvés à partir de la relation de dispersion démontrée précédemment (équation {2-6}) et en utilisant les indices illustrés à la figure {A.1}. En addition, l'image de gauche montre une carte des transformées de Fourier utilisées pour trouver la composante spectrale prédominante du champ. Le facteur de qualité des pics sur la carte correspond grossièrement à l'erreur sur la mesure, et non pas au facteur de qualité de la résonance. L'intensité des pics reste généralement constante, bien qu'aux basses énergies, le facteur de qualité devient très élevé (ici, caché par les points des données simulées).

La figure {2.6} illustre la très forte corrélation entre le mode optique simulé et le mode plasmon théorique, autant pour la partie réelle du vecteur d'onde (i.e. la relation entre la longueur d'onde et l'énergie) que pour la partie imaginaire (i.e. absorption longitudinale du mode plasmon). La méthode consiste à isoler le champ complexe du mode optique<sup>3</sup>, à utiliser une transformée de Fourier rapide (FFT) sur ces valeurs complexes et à trouver le pic en vecteur d'onde correspondant à la composante spectrale la plus importante (symboliquement :  $k'_x = \text{find}_k[\max(\text{FFT}\{H_z\})]$ ). Pour calculer la partie imaginaire, il suffit de produire une régression non-linéaire de la fonction exponentielle sur les valeurs d'intensité du champ complexe (symboliquement :  $\text{REG}\{I(x) ; a \cdot \exp(-2b \cdot x)\}$  où  $I(x) = H_z \cdot \overline{H_z}$  et  $b$  est la valeur de  $k''_x$ ). Cette technique est toutefois limitée en précision ; dans les hautes énergies, la mesure du vecteur d'onde du plasmon est inhibée par sa sévère absorption. Puisque dans ces énergies le mode ne se propage que sur une très courte distance (le mode transite vers l'état de polariton), la mesure du vecteur d'onde complexe s'avère impossible (autant de la partie réelle que la partie imaginaire). Les champs rapprochés dus à la diffraction sur le réseau présentent encore trop d'interférences à ces distances pour permettre l'observation solitaire du mode optique. Toutefois, dû à l'excellente corrélation aux énergies moins élevées, il est adéquat de conclure sur la nature du mode optique produit par la simulation FEM : ce dernier est bel et bien un mode plasmon.

Pour conclure ce chapitre, on note l'habileté aux simulations FEM à représenter fidèlement les résultats classiques tels que les phénomènes de réfraction et de TIR, de même que les phénomènes plus complexes, tels que le guidage et la résonance de plasmons de surface. Bien entendu, dû à la nature des simulations FEM de l'électromagnétisme, les résultats devaient être les mêmes, puisque la simulation FEM ne fait que résoudre un ensemble d'équations basées sur les équations de Maxwell. Il faut toutefois être prudent lors de la création des modèles, puisque ceux-ci peuvent produire des résultats biaisés ou même erronés sans que l'utilisateur en soit conscient. C'est pourquoi il est important de vérifier la concordance entre les résultats produits et les résultats dans la littérature, de même que de bien maîtriser les éléments de simulations utilisées (conditions aux frontières, modèles et équations). Les restrictions et les dangers de la simulation FEM sont traités dans le prochain chapitre.

<sup>3</sup> Le mode optique est un mode TM. La simulation résout la topologie des champs en résolvant uniquement pour la composante transverse au plan d'incidence, ici  $H_z$ . Afin d'isoler le mode, une coupe du champ est prise très près de la surface (dans le diélectrique) le long de l'interface, en dehors de la région rapprochée du réseau fini (cette région est arbitrairement définie à environ 3 longueurs d'onde autour du réseau physique).



## Chapitre 3 – Méthodes de simulations FEM et plasmons de surface

Les simulations FEM peuvent présenter un avantage considérable lors du cycle de développement de prototypes. Celles-ci sont basées sur des modèles théoriques connus et acceptés. En électromagnétisme, ce modèle théorique est la théorie électromagnétique des champs, exprimée entre autres par les équations de Maxwell. La simulation FEM présente l'avantage considérable de permettre la résolution des équations de Maxwell sur un domaine fini arbitraire. À l'intérieur des frontières, seulement la topologie des éléments simulés et leurs propriétés physiques (e.g. indice de réfraction) doivent être spécifiées pour permettre la résolution des équations différentielles régissant le système physique simulé ; aucune autre assumption n'est nécessaire. De fait, la simulation FEM ne présente aucune limite intrinsèque de complexité, les détails de l'architecture étant tenus en compte avec une simple équation de continuité. Les limitations physiques telles que la taille mémoire et la durée de temps disponible sont conceptuellement les seules restrictions à la complexité des modèles.

Toutefois, contrairement à une expérience réelle, une simulation présente un désavantage majeur : la réponse produite peut être un résultat artificiel erroné, sans relation avec l'architecture ou l'expérience "simulée". Les sources d'erreurs artificielles sont multiples, mais sont généralement dues à la principale limitation de la simulation FEM : un domaine fini force l'usage de conditions aux frontières. Ces dernières peuvent aisément créer des artifices si elles ne sont pas configurées très attentivement.

Les prochaines sections illustrent en détail le rôle et l'usage de conditions aux frontières dans différents scénarios. Les simulations sont décomposées étapes par étapes dans le raisonnement de création des différents modèles.

### 3.1 – Architecture sans diffraction

La première architecture à explorer est la plus simple : l'architecture en couches. L'architecture présentée ici n'utilise qu'une seule interface entre deux diélectriques, où la lumière se propagera verticalement avec un angle d'incidence. Une architecture en couche pourrait aussi incorporer la propagation de modes optiques, mais ceux-ci ne seront pas considérés ici, puisqu'ils font appels à une prémisse différente.

L'exemple présenté ici est celui de la réfraction. Il a été abordé sommairement dans le chapitre précédent afin de vérifier la validité des résultats produits par la simulation. Cette simulation sera décomposée ici afin d'en observer les détails techniques.

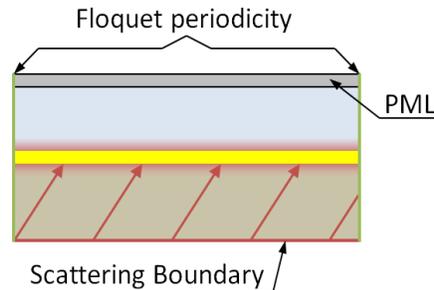


Fig. 3.1 - Schéma d'une architecture en couche sans diffraction. On note l'ajustement de la phase entre les champs aux frontières périodiques, fonction de la distance entre celles-ci. La zone supérieure est une couche absorbante à impédance parfaitement adaptée (*perfectly matched layer*).

Dû à la nature "infinie" de l'architecture (couches), les conditions aux frontières latérales sont établies comme périodiques, afin de permettre aux champs incidents et réfractés d'être continus. L'usage des conditions périodiques de Floquet permet la continuité des champs à tous les angles d'incidence (cf. *Floquet Periodic Boundary Conditions*, [24]). Contrairement à la condition périodique classique où les champs d'une frontière sont directement imposés sur sa réciproque, ces conditions tiennent en compte la distance entre les frontières et le vecteur d'onde projeté pour calculer la différence de phase nécessaire à appliquer sur les champs d'une frontière avant de les imposer sur l'autre. Cette condition n'est toutefois pas utilisable dans un système où les éléments présentent de la diffraction ; la relation entre diffraction et périodicité est discutée dans la prochaine section [3.3].

Les frontières inférieure et supérieure utilisent des conditions de dispersion (cf. *scattering boundary condition*, [24]), frontières qui permettent à certain champs d'être absorbés sans causer de réflexions. Ces frontières permettent aussi de spécifier un champ source, faisant donc aussi office d'émetteur. La condition de dispersion est parfaitement non-réfléctive lorsque les champs qui la frappent ont un vecteur d'onde précis et connu ; les champs qui présentent un vecteur d'onde différent seront partiellement réfléchis. Optionnellement, il est possible d'ajouter une couche absorbante à impédance parfaitement adaptée (cf. PML – *perfectly matched layer*) au domaine de simulation, afin d'absorber tous les champs qui y pénètrent sans causer de réflexions. Ceci dit, la condition de dispersion est ici suffisante, puisque les ondes réfléchies et transmises sur la structure présentent toutes le même vecteur d'onde projeté ( $k_x$ ).

Ce modèle permet l'investigation complète d'une structure en couche arbitraire, sans restriction sur l'angle d'incidence ou l'énergie utilisée.

### 3.2 – Architecture perturbée

Comme mentionné auparavant, le modèle précédent ne peut pas être utilisé avec confiance pour simuler des champs diffractés sur des objets contenus dans le domaine simulé. Toutefois, dans une situation où l'amplitude des champs diffractés est suffisamment faible pour être considérée comme une perturbation des champs EM émis de la source, la simulation va tout de même converger vers une solution réaliste. Puisque l'amplitude des ondes diffractées est faible en relation avec l'amplitude des champs aux frontières, le calcul de différence de phase des conditions périodiques de Floquet reste valable.

Par définition, la perturbation peut altérer le champ électromagnétique proche (*near field*), mais doit avoir relativement peu d'influence sur le champ électromagnétique lointain (*far field*). Le champ proche est déterminé comme le champ contenu à l'intérieur du domaine de simulation, loin des frontières non-absorbantes. La perturbation des champs doit rester locale au foyer de diffraction (la perturbation physique) et n'avoir que peu d'influence sur les frontières. Un foyer de diffraction se trouvant suffisamment près d'une frontière pour en affecter le champ EM ne peut être considéré comme une perturbation.

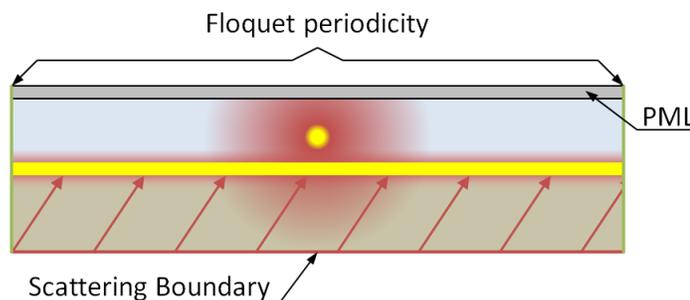


Fig. 3.2 - Schéma d'une architecture approximable à une architecture en couche faiblement perturbée. La simulation reste viable sous condition où les champs diffractés sont négligeables aux frontières périodiques.

Il est intéressant de noter que certaines frontières ne sont pas affectées par de telles perturbations. Les conditions aux frontières de dispersion de même que les PML absorbent les champs avec peu ou pas de réflexions. Même si le champ local est modifié, celui-ci n'influencera pas le reste de la simulation. Dans l'exemple précédent, seules les frontières aux conditions périodiques peuvent être affectées par une perturbation.

La figure précédente (figure {3.2}) illustre cette situation, où le champ proche d'une nanoparticule est fortement influencé par la perturbation, mais cette dernière n'influence pas les conditions aux frontières périodiques.

### 3.3 – Architecture avec réseau infini

Une architecture infinie se simule aisément lorsque cette dernière ne présente pas de diffraction ; le problème se représente avec un domaine fini, mais périodique. Cette périodicité peut facilement être exprimée puisque tous les champs présents dans le domaine présentent le même vecteur d'onde projeté. La difficulté émerge lorsque certaines portions de ces champs ne respectent pas cette condition, e.g. des champs diffractés par un réseau.

En d'autres mots, dans une architecture en couches utilisée en mode réfractif (aucun mode optique couplé), tous les champs respectent la condition périodique de continuité aux interfaces (dans ce cas-ci, le vecteur d'onde projeté  $k_x$  est constant dans toute l'architecture) ; les champs sont donc correctement représentés lorsque ce vecteur d'onde est utilisé dans les conditions périodiques de Floquet. Dans les cas où les champs sont fortement diffractés, ceux-ci ne respectent plus complètement cette condition de périodicité, puisque la périodicité de la structure ou des champs diffractés ne concorde plus nécessairement avec le vecteur d'onde projeté de la lumière incidente. Puisque le calcul de différence de phase se base sur un vecteur d'onde précis, ce dernier n'étant plus complètement respecté par tous les champs présents, il est prudent de conclure que les champs simulés ne seront pas représentatifs d'une situation réelle.

Dans le but de circonvenir à ce problème avec l'état présent des connaissances de l'auteur et de Comsol, deux voies de solution sont possibles en appliquant certaines restrictions : la restriction des analyses et la restriction de l'étendue de la simulation.

#### 3.3.1 – Restriction des analyses

Les conditions périodiques de Floquet permettent d'établir aisément une simulation à domaine fixe sans pour autant restreindre les caractéristiques de la lumière incidente (e.g. son angle d'incidence ou son énergie). Puisque les frontières périodiques tiennent compte du vecteur d'onde projeté de la lumière incidente, celui-ci n'est aucunement restreint. De par la nature de la simulation, il serait possible d'arriver aux mêmes résultats avec un domaine variable et des conditions périodiques

classiques. En ajustant la dimension du domaine de simulation dans l'axe de périodicité, il est possible de "tricher" avec la phase pour qu'elle corrobore directement entre les deux frontières.

Toutefois, lorsqu'une structure diffractive est présente (e.g. un réseau) dans le domaine, les dimensions de ce dernier importent ; elles représentent la périodicité physique de la structure. Puisqu'il est impossible d'ajuster la phase de la lumière incidente via une différence de phase artificielle (périodicité de Floquet) ou physique (périodicité classique), la solution est de restreindre les vecteurs d'ondes projetés à ceux qui conviennent aux dimensions du domaine. Les angles d'incidence admissibles seront ceux qui répondront aux équations suivantes, en tenant compte de l'énergie. Les variables  $d, n$  et  $\theta$  correspondent respectivement à la largeur du domaine de simulation (entre les frontières périodiques), l'indice de réfraction du milieu incident et l'angle d'incidence dans ce milieu.

$$\omega = c_0 \cdot k_0 \quad \text{et} \quad E = \hbar \omega$$

$$k_x \cdot \frac{d}{2\pi} = m \quad \text{où} \quad \begin{cases} m \in \mathbb{Z} \\ k_x = n k_0 \cdot \sin(\theta) \end{cases} \quad \{ 3-1 \}$$

Puisque les conditions périodiques sont classiques, le champ à une frontière sera directement reporté à la frontière conjointe, sans modification de phase et donc sans possibilité de déformer le signal. L'illumination aux angles adéquats permet de simuler des ondes planes infinies tout en émulant correctement la structure périodique. Un exemple serait d'illuminer un réseau infini d'une interface entre deux diélectriques depuis la normale ; les conditions périodiques classiques permettent la représentation du champ incident infini et émulent adéquatement la périodicité physique du système.

### 3.3.2 – Restriction de la simulation

La seconde approche pour résoudre le problème de la diffraction dans une simulation consiste à laisser tomber complètement l'usage de frontières périodiques. Au lieu de simuler un petit domaine avec des conditions périodiques pour émuler une structure infinie, cette seconde solution approxime directement l'étendue infinie de la simulation.

Dans le but d'avoir de multiples frontières absorbantes (dans ce cas-ci, les frontières latérales et la frontière supérieure), l'usage d'un faisceau non-infini est requis dans l'architecture de simulation. Comme le faisceau est non-infini, des effets de bords seront présents. L'objectif est de créer un domaine de simulation suffisamment large pour que les effets de bords du faisceau incident n'aient

pas d'influence sur les champs présents dans la zone d'intérêt. Les champs dans cette zone sont une approximation d'un cas infini.

Cette solution par approximation peut aussi être utilisée dans des situations plus complexes. Par exemple, lors du couplage d'un champ incident à un mode optique, même si le champ incident ne présente qu'une petite région influencée par des effets de bords du faisceau fini, l'effet de couplage est graduel et nécessite une certaine distance avant d'atteindre un état d'équilibre, une zone transitoire spatiale. Toutefois, si la zone d'éclairement est suffisamment large, le mode optique va pouvoir atteindre son état d'équilibre et pourra correspondre à celui obtenu à l'aide d'un faisceau infini. L'image suivante (figure {3.3}) montre cet effet dans le cas des champs associés aux plasmons de surface. De façon générale, la longueur de la zone transitoire peut être ajustée au besoin (en fonction de la qualité de saturation du mode nécessaire pour la mesure à effectuer). Trois fois la longueur de décroissance ( $L_{decay}$ ) du mode plasmon de surface signifie que le mode a atteint 95% de son intensité nominale ; au-delà de cinq fois la longueur de propagation, on considère que le mode plasmon a atteint un état stationnaire, puisque la croissance résiduelle est du même ordre de grandeur que les erreurs numériques de la simulation.

La simulation d'une structure infinie par une approximation via un large domaine est une méthode force brute. Elle requiert généralement beaucoup plus de ressources de calculs que les autres méthodes et présente aussi des artefacts dus à la simulation non-infinie qui doivent être tenus en compte. Toutefois, cette méthode présente aussi certains avantages, comme par exemple la plus grande diversité de cas où elle peut s'appliquer, la forme spatiale arbitraire de l'onde incidente de même que la possibilité d'étudier les modes optiques libres, découplés de sources externes.

En utilisant un faisceau non-infini, il est possible d'étudier les phases transitoires du couplage et du découplage des modes optiques et plasmoniques ou d'en étudier l'état d'équilibre. Cette approche "force-brute" est versatile et c'est celle qui est généralement utilisée dans ce mémoire.

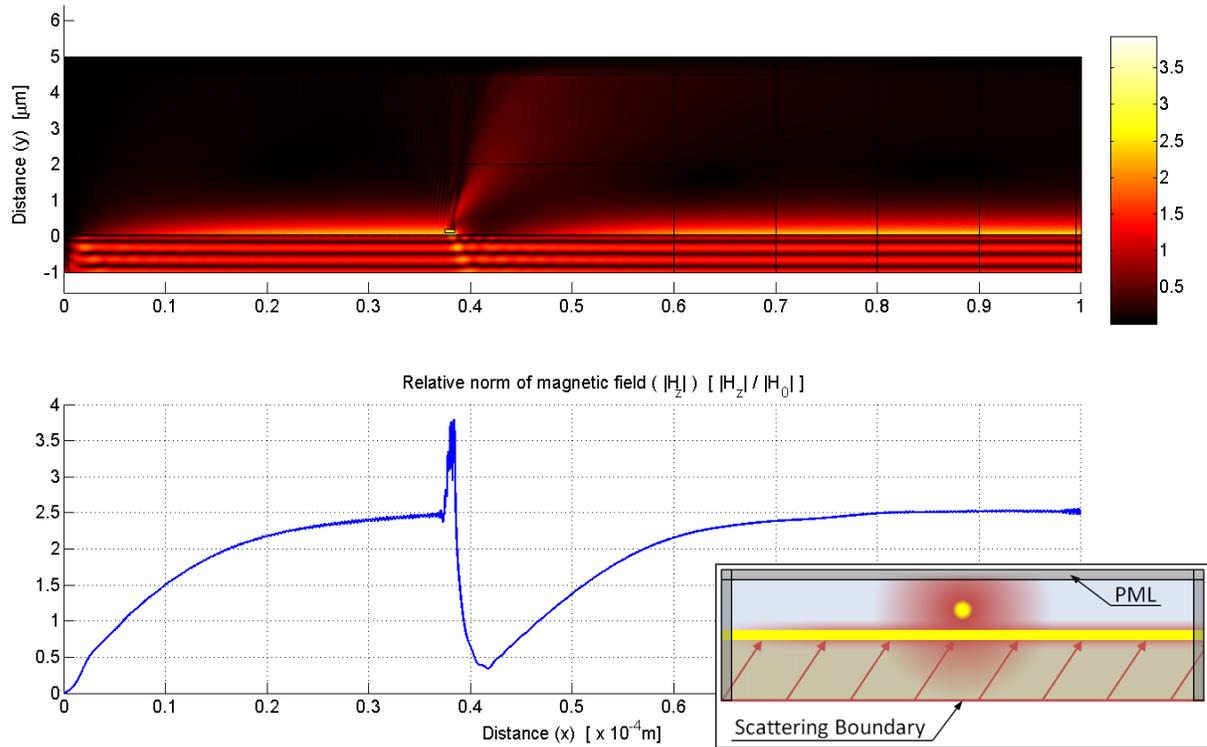


Fig. 3.3 - Observation de l'effet spatialement transitoire du couplage et de la déplétion provoquée d'un mode plasmon. Le couplage se fait par l'ordre 0 de diffraction (Kretschmann), le mode se propageant vers la droite (voir encadré et l'annexe A, section [A.2.2] pour les détails de l'architecture). On remarque la stabilisation du mode plasmon après environ  $30 \mu m$ . Au-delà de cette zone transitoire, il est possible d'approximer le mode comme étant le mode propre d'une injection infinie. Dans l'expérience illustrée ici, c'est là où la perturbation a été déployée afin d'observer son effet sur le mode plasmon.



## Chapitre 4 – Proposition d'un interféromètre plasmonique

Le développement d'un système de biodétection est le but de cette recherche. Toutefois, comme il en a été question dans le chapitre d'introduction et de révision, un biodétecteur intégré s'avère particulièrement intéressant par rapport aux mesures classiques par les avantages suivants : fiabilité et portabilité.

Les appareils existants répondent tous à divers degrés à ces critères. Les recherches en cours tentent d'améliorer les techniques et technologies présentes afin de mieux répondre à ces besoins. L'approche proposée est résumée ici.

La plateforme technologique composée de l'intégration partielle d'un biodétecteur sur une structure auto-émettrice est un intéressant point de départ. Cette plateforme aborde le problème d'accessibilité à la technologie directement en réduisant la taille et le coût relié à celle-ci. L'usage d'une structure compatible aux procédés de microfabrication couramment utilisés dans l'industrie de l'informatique et de la microélectronique indique la possibilité d'augmenter l'échelle de production aisément et à faible coût.

En contrepartie, les systèmes non-intégrés sont généralement plus versatiles sur les procédés de détection possibles mais aussi plus sensibles, dus à leurs systèmes optiques expansifs. Par exemple, le système de Patskovsky et al. [25] utilise une détection basée sur le changement de polarisation de la lumière réfléchie associée à la résonance de plasmon de surface. De façon générale, les méthodes basées sur la détection de changement de phase sont réputées très sensibles ; l'interférométrie en est un exemple classique.

L'intégration d'un système interférométrique et son couplage à la plateforme technologique déjà existante permettront l'implémentation d'une mesure basée sur la détection de phase. Cette mesure, additionnelle à la mesure classique de l'intensité, mènera à l'augmentation de la sensibilité du biodétecteur.

### 4.1 – Intégration d'un système interférométrique plasmonique

La prochaine section traitera des concepts d'interférométrie, appliqués aux plasmons de surface. Le but est de pouvoir intégrer ce système aux architectures déjà existantes. L'approche utilisée est axée sur la simulation des phénomènes physiques, tout en considérant les aspects expérimentaux.

L'architecture doit non seulement être sensible mais elle doit aussi être expérimentalement mesurable. Toutefois, avant d'entrer dans le détail, certains concepts doivent être clarifiés.

#### 4.1.1 – Révision de l'interférométrie

L'interférométrie est généralement utilisée pour mesurer la différence de chemin optique entre deux faisceaux. Conceptuellement, une source cohérente unique génère deux faisceaux (généralement un seul faisceau séparé en deux), qui sont dirigés chacun sur leur propre chemin optique. L'un d'eux est utilisé comme référence, alors que l'autre est utilisé comme faisceau de mesure ; ce faisceau de mesure est exposé au milieu ou à l'objet à caractériser, soit par transmission ou par réflexion. Les faisceaux sont ensuite recombinaison afin de les faire interférer ensemble ; les parties du faisceau en phase vont interférer constructivement alors que les parties déphasées vont interférer destructivement. Le patron d'interférence ainsi créé peut ensuite être analysé pour déterminer entre autres la densité optique ou la topologie de l'objet ou du milieu.

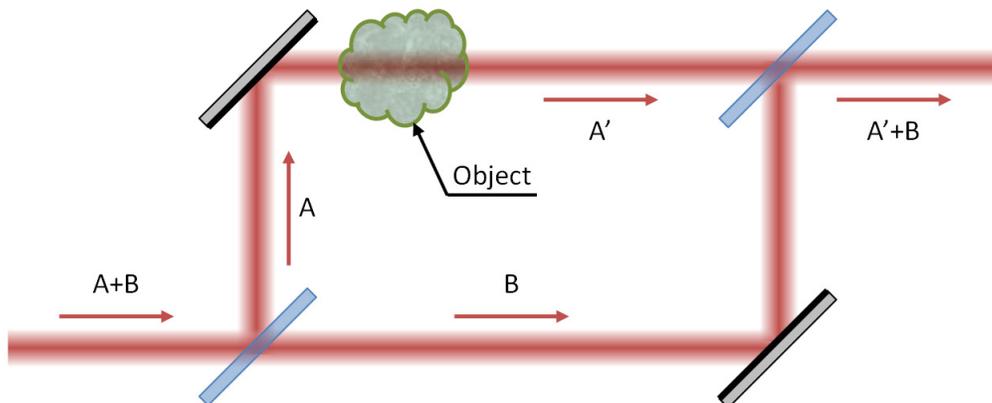


Fig. 4.1 - Conceptualisation d'un système interférométrique. La source cohérente (A+B) est séparée sur deux chemins optiques différents (A et B respectivement). Un des chemins est utilisé à titre de référence (B) et n'est pas modifié ; l'autre chemin est utilisé pour mesurer l'objet, changeant ainsi le faisceau (A'). La recombinaison (A'+B) produit le patron d'interférence.

Les éléments mis en évidence dans le schéma sont conceptuellement toujours nécessaires à l'interférométrie. La source unique sert à générer un faisceau optique cohérent avec lui-même. Cette longueur de cohérence est nécessaire pour que les faisceaux qui ont parcouru des chemins différents puissent être comparés, interférés. Une longueur de cohérence plus faible que la différence de chemin optique implique que les faisceaux ne sont plus cohérents entre eux, qu'ils n'ont plus une différence de phase constante ; le phénomène d'interférence devient donc imprévisible [9].

Les deux chemins optiques distincts permettent de retarder, de modifier la phase et/ou l'amplitude de l'un des faisceaux par rapport à l'autre. Ces modifications peuvent être causées par exemple par le passage de la lumière dans un milieu translucide ou par sa réflexion sur une surface inhomogène. Cette distinction de chemin optique est nécessaire pour pouvoir exposer un des faisceaux à l'environnement voulu, tout en isolant l'autre.

#### 4.1.2 – Réseaux finis : sources cohérentes de SP

Il est possible de transposer le concept de deux différents chemins optiques aux plasmons de surface en considérant le faisceau incident comme la source unique, qui couplé en deux endroits spatialement séparés créera deux modes plasmon distincts. Ces deux modes plasmon sont associables à deux chemins optiques distincts (voir figure {4.4}).

Il a été établi précédemment qu'il est possible de coupler une onde électromagnétique à un plasmon de surface via la diffraction sur un réseau. Or, en illuminant un réseau fini, la même chose se produit ; la lumière incidente diffracte sur le réseau, et la lumière diffractée au vecteur d'onde adéquat va produire un mode plasmon. En utilisant deux réseaux finis illuminés par la même onde incidente, les plasmons générés seront cohérents entre eux<sup>4</sup>. Le concept des sources de plasmons de surface est simple à comprendre ; par contre, avant de passer à l'application interférométrique, il est nécessaire de bien comprendre la mécanique de couplage aux réseaux non-infinis.

Une architecture de simulation est mise au point dans le but de démontrer les effets du nombre fini de périodes d'un réseau sur la fonction de couplage, la fonction représentant l'efficacité du transfert d'énergie de la lumière incidente vers le mode plasmon. L'architecture utilisée est représentée ci-dessous.

---

<sup>4</sup> La supposition est faite que la longueur de cohérence de la lumière incidente est beaucoup plus grande que les grandeurs caractéristiques de l'architecture.

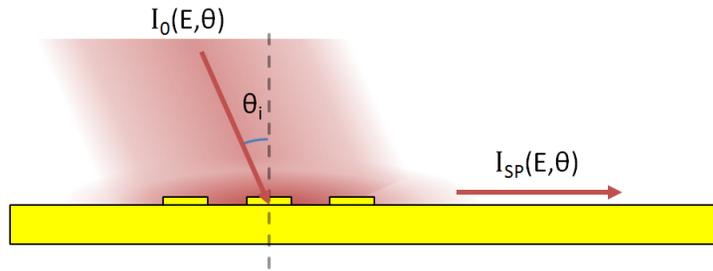


Fig. 4.2 - L'architecture utilisée consiste en une interface semi-infinie métal-diélectrique avec un réseau fini, d'un nombre entier de périodicités ; la périodicité correspond à la longueur d'onde plasmon, estimé avec l'équation {2-6}. Le faisceau incident frappe le réseau fini, et l'évaluation du transfert d'énergie entre  $I_0$  et  $I_{SP}$  est faite afin d'évaluer l'efficacité du couplage. Dans le but de simplifier l'expérience,  $\theta_i$  est fixé 0 degré ; pour chaque nombre de périodicités, l'énergie est variée afin d'observer la qualité de la résonance.

Pour observer l'efficacité du réseau à coupler la lumière incidente dans le mode plasmon, il suffit d'observer l'amplitude du mode plasmon en fonction de l'énergie ou de l'angle. Dans le but de simplifier les modèles FEM, la présentation et l'analyse, les simulations se limitent à l'évaluation de l'efficacité de couplage en énergie seulement. Le protocole de simulation et de mesure est détaillé dans l'annexe A.

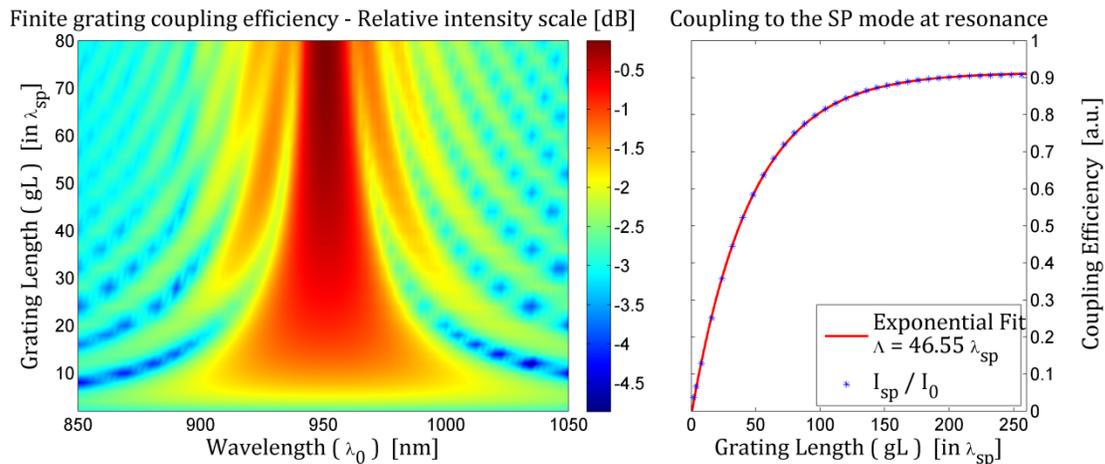


Fig. 4.3 - Efficacité de couplage d'une lumière incidente normale à la surface vers le mode plasmon à énergie correspondante. Le réseau fini est à périodicité fixe et à nombre de périodes variables ( $gL$ ) ; le réseau est illuminé par un faisceau de largeur  $gL+10$ , dont le profil d'intensité est spatialement plat et constant à  $190 \text{ W/m}^2$ . Les oscillations d'intensité en fonction de  $\lambda_0$  correspondent à la fonction de diffraction par un motif de taille finie. Les détails entre ces maxima sont des artefacts d'affichage, conséquents du manque de résolution dans les résultats.

On observe d'abord la forme caractéristique de la fonction de couplage. Une régression non-linéaire permet de confirmer que la forme de la réponse spectrale correspond bien au carré d'un sinus cardinal. En réduisant le nombre de périodes, les maxima secondaires vont s'éloigner du lobe principal et celui-ci va s'élargir, reflétant une diminution du facteur de qualité de la fonction *sinc*.

Dans la limite où le nombre de périodes tend vers 1, le spectre de couplage devient de plus en plus large, jusqu'à devenir constant sur toute la plage de vecteur d'ondes ou d'énergies investiguée. Ce comportement est interprété dans la prochaine section via une analyse de Fourier de la géométrie.

On note aussi à la figure {4.3} l'augmentation de l'intensité maximale de couplage avec l'augmentation du nombre de périodes. Cette croissance non-linéaire est attribuable à deux facteurs principaux. Le premier est l'augmentation de la puissance effective à laquelle le réseau est exposé ; l'onde incidente possède une intensité constante, et non une puissance constante (sur la surface du réseau), afin de représenter les conditions réelles de couplage d'un faisceau incident couvrant l'entièreté de l'architecture. Ceci permet de comparer directement l'efficacité de couplage entre des réseaux de différentes longueurs. Le second facteur est lié à la croissance graduelle et à la saturation du mode plasmon, tel que décrit à la section [2.2.1].

### *Interprétation de la fonction de couplage*

La forme particulière de la fonction de couplage en énergie est directement liée à la réponse spectrale de la microstructure couvrant l'architecture SPR. La diffraction de la microstructure étant à l'origine du couplage, la fonction de diffraction va nécessairement correspondre étroitement à la fonction de couplage entre l'onde incidente et le mode plasmon. Afin d'obtenir la réponse spectrale (la fonction de diffraction) d'une structure, il suffit de trouver la transformée de Fourier de cette dernière. Évidemment, il est possible de simplifier l'analyse d'une microstructure complexe en utilisant les règles mathématiques liées à la transformée de Fourier. Par exemple, dans le cas précédent du réseau fini, la réponse spectrale d'un réseau infini est modifiée par la convolution avec la fonction de diffraction d'une fenêtre de taille finie, conséquent de la multiplication spatiale du réseau infini avec la fenêtre finie.

De façon générale, il est possible de prédire partiellement la réponse spectrale d'une microstructure arbitraire autant en vecteur d'onde qu'en énergie ; une démonstration complète et rigoureuse est effectuée en annexe B. Cependant, il est important de noter que malgré son utilité, l'analyse de Fourier ne s'applique que pour promulguer une interprétation aux fonctions de couplages (ou alternativement une façon semi-quantitative de calculer celles-ci). En effet, cette dernière ne produit que le patron de diffraction d'une microstructure, sans tenir compte *a priori* des divers phénomènes optiques sous-jacents, tels la diffraction, le guidage ou l'efficacité de couplage des réseaux. C'est pourquoi la méthode FEM est employée.

### 4.1.3 – Système interférométrique intégré

Les réseaux finis décrits précédemment servent de sources de plasmons dans l'interféromètre. En disposant stratégiquement deux réseaux finis sur la surface de l'architecture, la lumière incidente va y produire des plasmons de surface ; l'un de ces plasmons va servir à faire la mesure alors que le second va servir de référence, similairement à un interféromètre classique. Dans le but de bien comprendre le système, les chemins optiques sont identifiés dans la figure suivante.

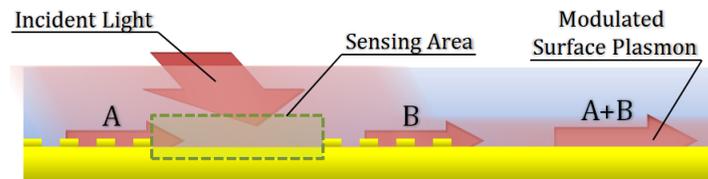


Fig. 4.4 - Illustration du concept d'interférométrie intégrée. Le mode plasmon de mesure (A) va traverser la cavité puis se propager à travers le second réseau fini, où le mode plasmon de référence (B) est couplé. Les deux modes vont interférer entre eux et produire un mode plasmon résultant (A+B) modulé en fonction de la différence de longueur de leurs chemins optiques respectifs. Une différence de chemin optique proportionnelle à la longueur d'onde du mode va produire un mode constructif.

Pour faciliter l'explication, les plasmons ont été identifiés A et B, pour les plasmons de mesure et de référence, respectivement. Une fois le mode plasmon A produit par le couplage avec la lumière incidente, celui-ci va se propager le long de la surface ; les plasmons vont se propager à travers la cavité, la zone médiane entre les deux réseaux. Après avoir traversé la cavité, le mode plasmon de mesure va poursuivre sa propagation et traverser le second réseau, en y perdant une partie de son intensité due à la diffraction ; le mode transmis à travers le réseau va interférer avec le mode B, le mode plasmon couplé par le second réseau. Cette interaction résultera en une modulation de l'intensité du mode plasmon combiné (A+B).

La réponse du système provient de la modification de la longueur du chemin optique de la cavité ; la modification de l'indice de réfraction dans celle-ci provoque ce changement de chemin optique. Suite à cette modification, le mode plasmon A va être déphasé par rapport à la situation naturelle, situation où la cavité n'est pas perturbée. Cette différence de phase va entraîner la modulation du signal combiné des deux modes plasmons (A et B). C'est ce signal qui est la réponse du système interférométrique ; cependant, ce signal est encore un mode plasmon, confiné à la surface.

#### *Observation de la modulation aux champs lointains*

Expérimentalement, l'observation en temps réel du champ rapproché requerrait un système additionnel, permettant par exemple de diffracter le mode combiné afin de le mesurer par la suite

(e.g. SNOM, nanoparticules ou rugosité de surface, réseau de diffraction) ; cette mesure est qualifiée "indirecte". Toutefois, il est primordial de noter que la modulation du mode plasmon combiné est observable directement au champ lointain à partir de la réflexion de l'onde incidente. En effet, lorsque l'interférence entre les plasmons A et B est constructive, le mode combiné est libre de se propager et de se disperser le long de l'interface, soit en étant absorbé par le métal ou en étant diffracté ; l'énergie est donc transférée librement de l'onde incidente vers les modes plasmons. Inversement, l'interférence destructive prévient la circulation de l'énergie de l'onde incidente vers les modes plasmons, puisque ceux-ci sont confinés dans la cavité en un mode stationnaire. De façon effective, l'énergie de l'onde incidente normalement couplée aux modes plasmon est maintenant fortement réfléchi lorsque l'interférence destructive prévient la propagation des modes plasmons.

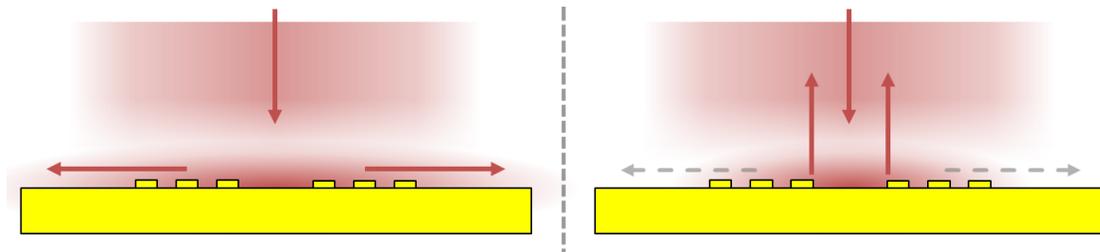


Fig. 4.5 - L'image ci-dessus présente conceptuellement le parcours et les transferts d'énergie entre l'onde incidente et les modes plasmons. Le premier cas à gauche illustre la situation où les modes plasmons peuvent se propager librement, sans être restreints par le phénomène d'interférence. Le second cas à droite illustre la situation où le phénomène d'interférence prévient partiellement ou complètement la propagation des modes plasmons. De ce fait, il y a restriction du couplage, ce qui résulte dans la réflexion de l'énergie de l'onde incidente.

La modulation interférométrique du mode combiné va être reproduite dans le signal réfléchi, autant en énergie qu'en angle d'incidence, permettant ainsi l'observation directe du phénomène en champs lointains.

### *Qualité de la modulation*

L'intensité de la modulation sera maximale si l'amplitude des deux plasmons sont comparables lorsqu'ils sont superposés. Pour que l'intensité de ceux-ci soit identique, il faut tenir compte des efficacités de couplage des réseaux, de la distance supplémentaire de propagation du mode A de même que sa diffraction sur le second réseau. Ces détails d'optimisation peuvent être tenus en compte pour obtenir une qualité maximale du signal. Toutefois, comme la modulation est observable dans un cas symétrique et où la longueur de cavité maximale est de l'ordre de la longueur

de propagation, ces détails ne sont pas considérés ; ceci afin de simplifier l'investigation du système interférométrique et de ses modes d'application.

En champ lointain, la qualité de la modulation observable est proportionnelle à la quantité d'énergie qu'il est possible de coupler dans ces modes plasmons (dans les conditions de couplage maximales) en rapport avec la quantité d'énergie qui est injectée dans le système. En supposant que la largeur du faisceau incident est limitée à la cavité et aux réseaux, on conçoit aisément que plus la cavité est grande, plus la modulation va être petite. La partie de l'onde incidente dans la cavité va être réfléchie sans être couplée, et constituera le signal de fond de la mesure en champ lointain. De plus, la qualité de la modulation aux champs rapprochés détermine aussi l'amplitude des modulations observables en champ lointain.

### *Modes d'opération*

L'architecture présentée précédemment peut être utilisée de deux façons. La première consiste à confiner le changement d'indice de réfraction à l'intérieur de la cavité seulement. Le couplage de la lumière incidente vers les plasmons de surface restera inchangé sous toutes conditions ; l'intensité du mode combiné n'est que le résultat de l'interférence des plasmons. Ce mode d'opération (mode interférométrique) sera abordé en détail dans la prochaine section. Le second mode d'opération apparaît lorsque le changement d'indice de réfraction s'applique globalement sur la cavité de même que sur les réseaux. Le changement d'indice sur les réseaux modifie les conditions de couplage, et donc déplace la résonance en énergie ou en angle. De plus, l'effet d'interférence est toujours présent, ce qui implique l'ajout de franges d'interférence dans la réponse spectrale du système et la modulation de la résonance en amplitude avec les changements d'indice de réfraction. Ce mode d'opération beaucoup plus subtil sera traité dans une section ultérieure.

## **4.2 – Mode 1 – Interférométrie seulement**

L'usage de plasmons de surface comme sources cohérentes dans un système interférométrique n'est pas complètement novateur. Des systèmes interférométriques simples ont en effet déjà été démontrés pour des modes optiques confinés ou même des plasmons guidés [26, 27]. Dans ce cas-ci, on démontre une approche différente à l'interférométrie "conventionnelle" ; cette approche différente superpose directement les chemins optiques, réduisant la dimensionnalité nécessaire du système. La figure {4.4} présente la conceptualisation de cette architecture aux chemins optiques

superposés. Les réponses spectrales sont établies à partir de l'énergie couplée dans le mode plasmon qui se propage hors de la structure interférométrique, telle qu'illustrée à la figure {4.6}.

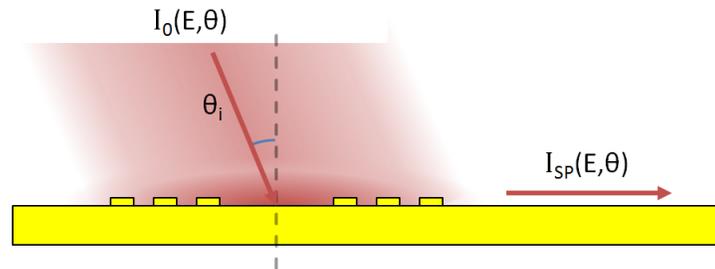


Fig. 4.6 - L'architecture utilisée consiste en une interface semi-infinie métal-diélectrique avec deux réseaux finis, séparés par une cavité de longueur  $L_{cav}$  ; le protocole de simulation et de mesure est le même que celui employé à la section [4.1.2], à la différence que le paramètre physique investigué est la longueur de la cavité. La périodicité et le nombre de périodes des réseaux sont conservés constants afin d'obtenir la réponse spectrale. Pour des détails additionnels, voir l'annexe A.

La prochaine section décrit le comportement du système en lien avec ses paramètres physiques, telles sa réponse spectrale et l'influence de la longueur de la cavité sur celle-ci. Par la suite, la section suivante investiguera l'influence d'une modification d'indice de réfraction sur le système et l'impact des paramètres systèmes sur la sensibilité de l'architecture.

### 4.2.1 – Réponse spectrale

Examinons tout d'abord la réponse spectrale du système, pour une architecture fixe, i.e. des conditions de couplage définies pour une énergie précise. Ces réponses vont permettre de caractériser le comportement d'un système réaliste (système fixe avec entrées variables).

Commençons par analyser le comportement de l'architecture en fonction de la longueur de la cavité. Intuitivement, la situation où la cavité est nulle devrait correspondre à la réponse spectrale d'un réseau de longueur  $2NP^5$ , alors que la situation où la longueur de la cavité tend vers l'infini devrait produire la réponse spectrale d'un réseau unique de longueur  $NP$ . Observons cette transition.

<sup>5</sup> N et P sont respectivement le nombre de périodes et la périodicité du réseau fini ; NP correspond donc à la longueur du réseau.

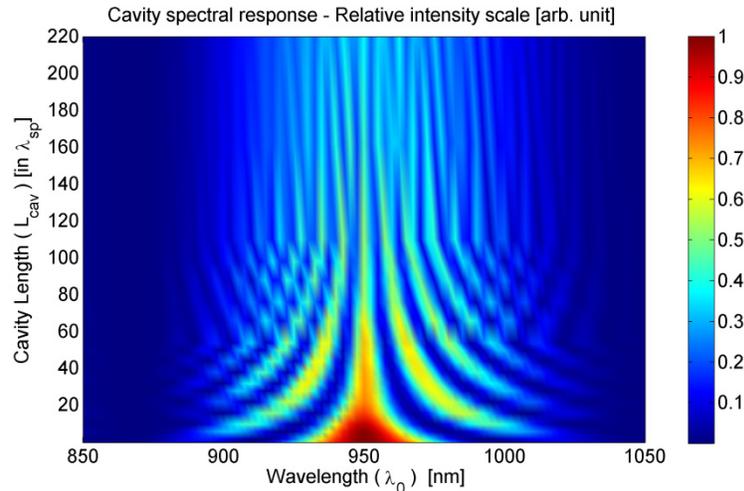


Fig. 4.7 - Effet de la longueur de la cavité sur la réponse spectrale du système interférométrique, pour des réseaux identiques de longueur fixe. Les réseaux ont une périodicité de  $2\pi/\lambda_{sp}$  pour  $\lambda_0 = 950\text{nm}$  et ont chacun 10 périodes. La longueur caractéristique de décroissance à  $\lambda_0 = 950\text{nm}$  est de  $51.5\mu\text{m}$ , ou  $54.86\lambda_{sp}$ . On observe des artefacts de crénelage (*aliasing*), causé par la faible résolution en longueur d'onde. Voir annexe A pour plus de détails.

La figure {4.7} montre la réponse spectrale de l'interféromètre lors d'une variation de longueur de la cavité. Dans un système sans cavité, la réponse caractéristique d'un système à réseau unique fini correspond à un sinus cardinal (voir section [4.1.2]); on note que le protocole de mesure est le même, tel que décrit en annexe A.

Pour toutes les longueurs de cavité ( $L$ ), on observe une enveloppe générale correspondant à la réponse spectrale de diffraction des réseaux finis de l'architecture (un *sinc* associé à un réseau fini de longueur NP). À grande distance, ces deux réseaux n'interagissent que faiblement (dû à la décroissance exponentielle des plasmons de surface), d'où la faible intensité des franges d'interférence. Au fur et à mesure que les réseaux se rapprochent, l'interaction entre eux augmente en intensité, d'où l'augmentation de l'intensité des franges d'interférence autour de l'enveloppe. Dans la limite où la longueur de la cavité tend vers 0, le patron converge de nouveau vers un sinus cardinal, associé à un réseau de longueur 2NP. L'équation {B-10} de l'annexe B décrit la fonction mathématique de ces franges d'interférence, caractérisant leur amplitude et leur distance.

Ce changement de réponse spectrale du système à un changement de longueur de cavité peut être qualifié de **macroscopique**, puisque seules des longueurs entières de cavités ont été considérées, c'est-à-dire des longueurs correspondant à des nombres entiers multiples de la longueur d'onde du mode plasmon. Toutefois, le système possède un comportement particulier à une échelle qualifiable

de **microscopique**, où les variations de longueurs de cavité correspondent plutôt à des fractions de longueur d'onde du mode plasmon.

L'image {4.8} illustre ce comportement microscopique de la réponse spectrale lors de la transition entre des longueurs correspondant à des modes d'interférences constructifs de la cavité. Il est possible d'expliquer ce déplacement de résonance vers les plus grandes longueurs d'onde de la façon suivante : en supposant le mode de longueur d'onde  $\lambda$  parfaitement en phase avec le second réseau, l'augmentation de la longueur de la cavité par un  $\partial L$  déplace la condition de phase constructive par un  $\partial\lambda$  positif. Sans la modulation de la fonction de couplage des réseaux (l'enveloppe), l'image présenterait des lignes. Puisque le changement de la longueur de la cavité est associable à un changement d'indice effectif de celle-ci, cette explication sera reprise plus rigoureusement dans la section [4.3.2].

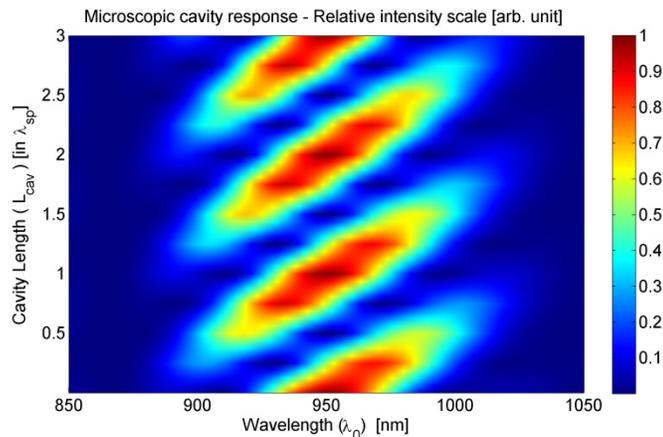


Fig. 4.8 - Effet microscopique de la longueur de la cavité sur la réponse spectrale du système interférométrique, tel que décrit à la figure {4.6} et {4.7}. De façon intuitive, le déplacement du second réseau par rapport au premier provoque dans l'espace réciproque l'ajout d'une phase complexe, qui provoque la "rotation" de l'intensité de diffraction (voir l'équation {B-10}) en fonction de  $L$  à l'intérieur de l'enveloppe du sinus cardinal de la fenêtre rectangle des réseaux.

### 4.2.2 – Indices de réfraction

Avant de passer à l'analyse de l'impact d'une modification de la cavité par un changement d'indice de réfraction, il est nécessaire de définir les indices de réfraction employés dans les simulations à venir. L'image {4.9} illustre sommairement l'architecture de la simulation, de même que la fonction utilisée pour représenter la variation d'indice de réfraction à la surface du biodétecteur ; cette fonction, modulable par un facteur multiplicatif  $\Delta n$  associable à une concentration, émule la variation d'indice de réfraction causée par la capture d'agents viraux à la surface du biodétecteur.

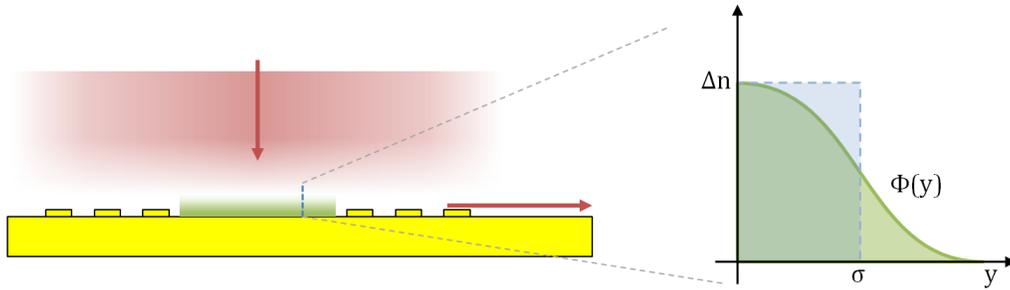


Fig. 4.9 - Topologie de la fonction d'indice de réfraction, associable à une déposition spécifique de biomolécules à la surface de l'architecture. Le graphique illustre une coupe transversale de la fonction d'indice de réfraction. La courbe est la fonction utilisée en simulation, c'est-à-dire  $\Phi(y)$ . La zone pointillée bleue représente la couche effective équivalente, d'épaisseur  $\sigma$  et de différence d'indice  $\Delta n$ .

La fonction de densité optique a été choisie de façon arbitraire, en considérant toutefois la représentation géométrique approximative d'une déposition de biomolécules à la surface. La fonction est définie pour conserver la même épaisseur (défini par  $\sigma$ ) pour toutes les concentrations, émulant ainsi une déposition en monocouches. Une augmentation en concentration est représentée par une augmentation de la densité optique de la couche, donc une augmentation de l'indice de réfraction total ( $n_c$ ). La fonction de l'indice de réfraction est la suivante.

$$n_c = n_0 + \Phi(y)$$

$$\Phi(y) = \begin{cases} \Delta n & y \in ]-\infty, 0[ \\ \frac{\Delta n}{2} \left( \cos\left(\frac{\pi}{2\sigma}y\right) + 1 \right) & \forall y \in [0, 2\sigma] \\ 0 & y \in ]2\sigma, \infty[ \end{cases} \quad \{4-1\}$$

Afin de mettre en évidence le mode d'opération interférométrique, **l'indice de réfraction est confiné à la cavité uniquement**. On note ici que  $n_c$  n'est pas un indice de réfraction effectif. L'indice de réfraction effectif considère la forme du mode plasmon pour évaluer la moyenne d'indice de réfraction perçu. Dans ce cas-ci, l'indice de réfraction effectif est défini comme suit.

$$n_{eff} = n_0 + \frac{\int_0^\infty \Delta n(y) \cdot I_{SP_y}(y) dy}{\int_0^\infty I_{SP_y}(y) dy} \quad \{4-2\}$$

Cette formule correspond à la moyenne de l'indice de réfraction pondérée par l'intensité du champ du mode plasmon. Le calcul est effectué numériquement et bien que la valeur d'indice de réfraction effectif calculée tende vers la valeur analytique, certaines limitations de la simulation font en sorte que cette évaluation numérique reste approximative. La première de ces limitations est la taille finie du domaine simulé versus la longueur caractéristique de décroissance des plasmons dans le

diélectrique ; plus cette longueur est faible par rapport à la taille du domaine, plus l'intégrale émule bien la limite infinie. La seconde limitation est l'impossibilité de différencier ou d'isoler les différents modes optiques diffractés ; une solution est de faire le calcul numérique sur la même architecture avec seul le mode plasmon présent.

Ces deux définitions d'indices de réfraction ( $n_c$  et  $n_{eff}$ ) présentent leurs avantages respectifs. Comme mentionné plus tôt,  $n_c$  est aisément associable à la concentration moyenne de biomolécules spécifiquement adsorbées à la surface du biodétecteur, via la constante  $\Delta n$ . Toutefois, cette définition d'indice ne tient pas compte de la modification du mode optique consécutive de la topologie d'indice de réfraction, contrairement à la définition de  $n_{eff}$ . Afin de pouvoir relier le changement d'indice de réfraction aux changements de chemin optique observés, il serait nécessaire d'utiliser cette dernière définition. Toutefois, l'objectif de ce mémoire n'est pas de déterminer la relation quantitative entre les changements de phase des modes plasmons et les changements d'indices de réfraction, mais plutôt d'examiner la réponse et la sensibilité du système dans le cadre d'une application en biodétection. En conséquence, la représentation plus simple et plus directe de la variation d'indice de réfraction par  $n_c$  est utilisée.

Maintenant que les indices de réfraction sont définis, il est temps d'aborder la réponse du système interférométrique à un changement de conditions de surface, de même que les diverses répercussions des différents paramètres du système.

### 4.2.3 – Indice de réfraction et réponse spectrale

Puisque le changement d'indice de réfraction est confiné dans la cavité, la réponse spectrale du système, au niveau de l'enveloppe, reste inchangée avec le changement d'indice. La position de l'enveloppe ne montre aucune dérive due au déplacement de la résonance avec les réseaux. La figure suivante {4.10} montre cette stabilité de l'enveloppe.

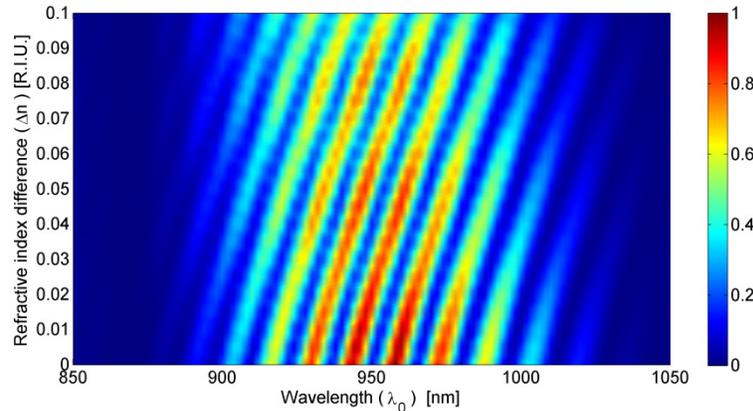


Fig. 4.10 - Réponse spectrale de l'interféromètre sous un changement d'indice de réfraction de la cavité. L'architecture est la même que celle illustrée aux figures {4.6, 4.7 et 4.8}, à l'exception que le paramètre maintenant investigué est l'indice de réfraction de la cavité, comme illustré à la figure {4.9}. La périodicité et le nombre de périodes des réseaux, de même que la longueur de la cavité restent inchangés. La longueur de la cavité est fixée à  $\sim \lambda_{decay}$ , c'est-à-dire  $54.5\lambda_{sp}$  pour  $\lambda_0 = 950\text{nm}$ .

Cependant, le changement d'indice de réfraction produit un changement de longueur de chemin optique pour le mode plasmon se propageant dans la cavité (voir équation {4-3}). Or, de façon effective, cet effet est directement associable au changement de longueur de la cavité, observée dans les images {4.7} et {4.8}, de même que souligné à l'équation {4-4}. L'explication détaillée de la dérive des franges d'interférence est traitée dans la section [4.3.2].

#### 4.2.4 – Sensibilité de l'interféromètre

Observons maintenant l'impact de l'architecture sur la sensibilité de l'interféromètre. Afin de simplifier la représentation visuelle, une comparaison directe est effectuée avec la figure {4.10} ; les deux images de la figure {4.11} utilisent la même expérience, à l'exception de la longueur de la cavité, qui a été réduite de moitié pour l'image de gauche.

La réponse spectrale de la figure {4.11} illustre l'intensité du plasmon de surface combiné, résultant de l'interférence entre les plasmons des deux réseaux, en fonction de la longueur de la cavité et de l'indice de réfraction de la perturbation. On remarque tout d'abord l'effet flagrant de la longueur de la cavité ; comme introduit à la section [4.2.1], la longueur de la cavité détermine la largeur et la distance des franges d'interférence. La longueur de la cavité est exprimée comme un nombre de longueurs d'onde de plasmon ( $L_{cav} = d/\lambda_{sp}$ , où  $\lambda_{sp}$  est la longueur d'onde plasmon pour une énergie fixe et  $d$  est la distance entre les réseaux). Ainsi pour une cavité non-perturbée, lorsque la distance correspond à un entier ( $L_{cav} = m\lambda_{sp}$  où  $m \in \mathbb{Z}$ ), les modes plasmons des deux réseaux sont en phase, entraînant une interférence constructive en dehors de la cavité.

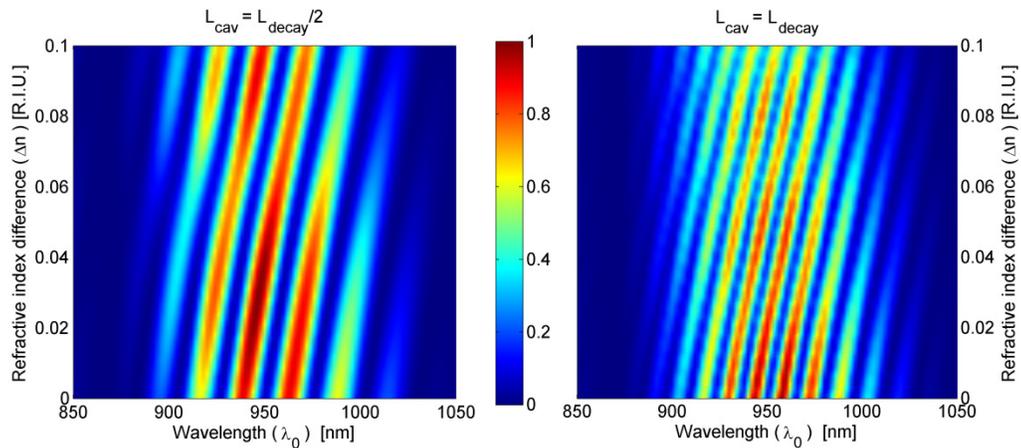


Fig. 4.11 - Comparaison directe entre les réponses spectrales de deux cavités ayant des longueurs différentes. L'image de droite est la répétition de la figure {4.10}, avec une longueur de cavité de  $54.5\lambda_{sp}$  ; l'image de gauche présente les mêmes caractéristiques, outre la longueur de cavité de  $27.5\lambda_{sp}$  toujours pour  $\lambda_0 = 950\text{nm}$ .

En perturbant graduellement la cavité, le plasmon qui la traverse est graduellement retardé jusqu'à ce qu'il soit complètement déphasé ( $\varphi = 180$  degrés) puis consécutivement de nouveau en phase ( $\varphi = 360$ deg) avec le plasmon de référence, entraînant tour à tour une interférence destructive puis constructive. Afin de mettre en évidence la variation d'intensité en fonction d'un changement d'indice de réfraction à **énergie fixe**, on représente sur la figure {4.12} une coupe transversale de la réponse spectrale à différentes longueurs de cavité.

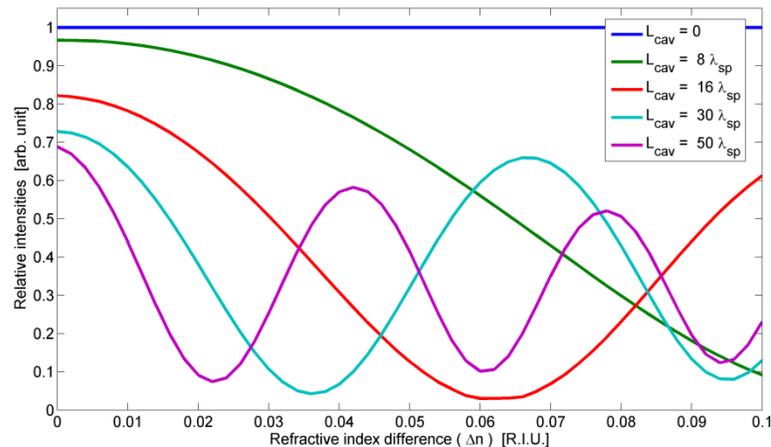


Fig. 4.12 - Coupe transversale de la réponse spectrale à énergie fixe,  $\lambda_0 = 950\text{nm}$ . Les intensités sont normalisées avec la valeur de la réponse spectrale du mode plasmon diffracté en l'absence de cavité ( $L_{cav} = 0$ ). La coupe illustre la capacité à l'interféromètre de suivre l'évolution de l'indice de réfraction pour une énergie fixe.

On remarque sur la figure {4.12} que pour les longueurs de cavités faibles, la variation d'indice ne présente aucun effet significatif sur la phase du mode plasmon de mesure ; il en est tout autrement

pour les longueurs de cavité plus grande. Plus la cavité est longue (pour une énergie fixe), plus le déphasage se produit rapidement pour les mêmes variations d'indices. La sensibilité de l'interféromètre augmente donc avec la longueur ; toutefois, ceci n'est que la conséquence de la relation directe entre le chemin optique et la distance parcourue par le mode.

$$\mathcal{L} = k \cdot d \quad \{ 4-3 \}$$

Il existe toutefois une limite à la longueur de la cavité. En effet, les plasmons de surface présentent une décroissance exponentielle avec la distance de propagation. Ainsi, une cavité plus longue implique une distance de propagation plus grande et donc une réduction de contraste d'interférence. Cette diminution de contraste émerge du déséquilibre entre les amplitudes des ondes plasmon. Lorsque les deux modes ont la même intensité, la modulation du signal est maximale. Par contre, plus le mode plasmon de mesure perd en intensité, plus la modulation du signal est faible. En normalisant la longueur de la cavité par la longueur caractéristique de décroissance ( $L_{decay}$ ) du mode plasmon, le signal de sortie aura un ratio signal/bruit approximativement constant d'une énergie à l'autre.

En exprimant le chemin optique en fonction d'une cavité à qualité de signal constant (longueur de cavité proportionnelle à la longueur de décroissance via une constante de proportionnalité  $\gamma$ ), on obtient mathématiquement :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= k \cdot d \\ &= \frac{2\pi n_{eff}}{\lambda_{sp}} \cdot \gamma L_{decay} \\ &\propto \frac{L_{decay}}{\lambda_{sp}} \end{aligned} \quad \{ 4-4 \}$$

Le chemin optique est donc proportionnel au ratio  $L_{decay}/\lambda_{sp}$  pour une cavité à qualité constante. On rappelle que la sensibilité de l'interféromètre dépend du changement de phase subit par le plasmon de mesure en traversant la cavité ; or, ce changement de phase est proportionnel à la longueur du chemin optique de la cavité. En considérant cette relation, observons le comportement du système en fonction de l'énergie, tout en gardant les conditions de résonances optimales à chacune d'elle. La figure {4.13} présente le résultat d'un ensemble de simulations, où la longueur de la cavité est fixée à  $L_{decay}(\lambda_0)$ , dans le but d'obtenir une qualité de signal constante ; la longueur est

arrondie au demi-entier le plus près afin d'avoir toutes les simulations qui débutent en mode destructif (à des fins de comparaisons directes), à  $\Delta n = 0$ .

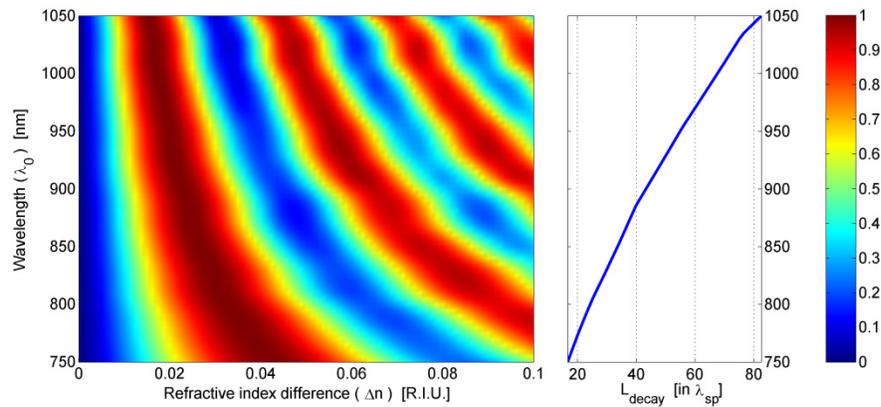


Fig. 4.13 - Démonstration de la sensibilité de l'interféromètre avec la longueur d'onde. Pour chaque énergie, le système simulé est configuré pour être à la résonance ; les réseaux correspondent à  $\lambda_{sp}$  pour cette énergie. La longueur de la cavité est ajustée de façon à obtenir un facteur de qualité constant entre les énergies ( $L_{cav} = L_{decay}(\lambda_0)$ ). Les intensités sont normalisées. La ligne illustre l'augmentation du ratio  $L_{decay}/\lambda_{sp}$  (voir équation {4-4}).

On observe sur celle-ci (fig. {4.13}) qu'il y a une dépendance non-linéaire en énergie entre la longueur d'onde et la longueur de décroissance du mode plasmon, que le ratio  $L_{decay}/\lambda_{sp}$  augmente avec la longueur d'onde. De ce fait, on remarque que le chemin optique de la cavité augmente avec la longueur d'onde (par l'équation {4-4}), provoquant l'augmentation effective en sensibilité de l'interféromètre.

Bien que la longueur soit le principal acteur de la sensibilité de l'interféromètre, cette longueur se trouve à être limitée par la qualité du signal produit. Or, sous condition de qualité de signal constante, les plus grandes longueurs d'onde sont avantagées dues à leurs plus grandes longueurs caractéristiques de décroissance, autorisant ainsi de plus longues cavités. Toutefois, cette augmentation en sensibilité a un prix, couvert dans la section [4.2.5].

### *Sensibilité versus la SPR*

Lorsqu'il est question de sensibilité, il est important de faire la nuance entre la sensibilité inhérente au mécanisme physique exploité et la sensibilité liée aux limitations expérimentales. Dans un appareil SPR classique, la sensibilité caractérise l'habilité de l'appareil à suivre le déplacement de la résonance plasmon, soit en énergie ou en angle. Puisque le déplacement de la résonance est décrit par une fonction monotone, la sensibilité quantitative de l'appareil ne dépend que de la précision des instruments de mesure utilisés. Il en va de même pour l'interféromètre.

Cependant, lorsqu'il est mentionné que la sensibilité de l'interféromètre augmente avec la longueur de la cavité, c'est en considérant une précision finie dans la mesure d'intensité, soit spectrale ou angulaire. Une augmentation de la longueur de la cavité va résulter en un changement plus rapide de l'intensité pour un même changement d'indice de réfraction, d'où l'augmentation en "sensibilité" pour une mesure avec une précision finie. Toutefois, cette augmentation en sensibilité via l'augmentation de la longueur de la cavité possède une limite théorique, qui est celle de la résonance plasmon classique.

Plus précisément, la sensibilité inhérente du phénomène de résonance plasmon reste inchangée par la géométrie. En effet, le déplacement des franges d'interférence illustré à la figure {4.11} n'est aucunement affecté par la géométrie. Or, ce déplacement est directement associable à la résonance des plasmons de surface (voir section [4.3.2]). Peu importe le nombre et la largeur des franges, la capacité théorique à détecter la dérive des franges ou le changement d'intensité d'une frange à l'autre dépend uniquement de la **précision sur la mesure**. Cette précision aura le même impact sur la sensibilité de la mesure interférométrique que sur la sensibilité de la mesure de la résonance plasmon. De façon **théorique**, les sensibilités de ces deux techniques sont au mieux identiques. Expérimentalement toutefois, il en est autrement.

Dans l'expérience proposée ici, la multiplicité des franges et des pics met en évidence deux avantages expérimentaux versus la SPR classique. Le premier est qu'il est possible d'utiliser un autre schème de mesure pour suivre l'évolution de l'indice de réfraction, via une mesure en intensité à énergie fixe. La figure {4.12} illustre parfaitement ce concept, où l'intensité n'est mesurée qu'à une seule énergie.

Cependant, le second et principal avantage est la possibilité d'avoir une plus grande précision sur la mesure expérimentale via un plus grand nombre d'informations. En observant une plage d'énergies (e.g. fig. {4.10}), il est possible de suivre le déplacement des franges d'interférence à l'intérieur de l'enveloppe. Or, ce déplacement peut être utilisé pour caractériser de façon beaucoup plus précise le changement d'indice de réfraction, au même titre que le déplacement de la résonance de plasmon de surface peut l'être pour une architecture classique. Il sera démontré à la section [4.3.2] que le déplacement de ces franges est identique au déplacement de la résonance plasmon, ce qui signifie que pour une mesure en énergie, la sensibilité de la méthode interférométrique est au moins aussi précise que la SPR. L'augmentation de la longueur de la cavité ne fait que resserrer les franges d'interférence. Cependant, cette multiplicité de franges peut être utilisée pour augmenter la

précision et la fiabilité de la mesure (par méthode de régression et/ou comparaison sur plusieurs pics).

#### 4.2.5 – Observabilité au champ lointain

Comme abordé précédemment (voir la section [4.1.3]), l'amplitude de l'onde réfléchie sur la surface de l'interféromètre est dépendante de l'interaction des modes plasmons. Dans le cas où l'interférence est destructive, l'énergie normalement<sup>6</sup> couplée aux modes et absorbée par le métal sera maintenant réfléchie. Cependant, certains détails de conception sont importants à considérer relatifs à la mesure effectuée au champ lointain.

Le premier détail est la surface illuminée par le faisceau incident. Dans les régions sans réseau, l'onde incidente est entièrement réfléchie, et ce, sous toutes conditions d'angles ou d'énergies. Cette lumière réfléchie ajoute un biais aux modulations produites par le système. De même, la diffraction de l'onde incidente par les réseaux n'est pas parfaite ; la portion d'énergie réfléchie dans l'ordre 0 et les autres ordres de diffraction (non plasmon) ajoute aussi au biais. L'amplitude de la modulation consiste donc approximativement en la fraction d'énergie qu'il est possible de coupler aux modes plasmons, en ne considérant pas les effets d'interférences. Ainsi, l'estimation de l'amplitude de la modulation sur la valeur du signal total est la suivante, dans des conditions d'interférence optimales.

$$\frac{I_{mod}}{I_0} \cong \frac{\int I_0(\mathbf{r}) \cdot A_{réseaux}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int I_0(\mathbf{r}) \cdot A_{faisceau}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} \cdot \sum_m C_m \quad \{ 4-5 \}$$

Dans l'équation précédente, l'intégrale au numérateur représente la somme de la surface couverte par les réseaux ou le faisceau complet (représenté par  $A(\mathbf{r})$ ) pondérée par la densité d'énergie de l'onde incidente ;  $C_m$  représente le coefficient de couplage du réseau vers un mode plasmon  $m$  accessible avec l'architecture considérée. Dans le cas où l'intensité du faisceau incident est constante sur toute la surface, la fraction d'énergie qu'il est possible de coupler en plasmon sera approximativement proportionnelle à la fraction d'aire couverte par les réseaux versus l'aire totale du faisceau. Bien que le biais ne soit pas à proprement parler un bruit de fond, celui-ci va tout de même avoir au mieux la conséquence expérimentale de réduire la plage dynamique de mesure de la modulation.

---

<sup>6</sup> On entend par "normalement" le cas où l'interférence est constructive.

Le second facteur influant sur la modulation est la qualité de l'interférence ; or, celle-ci dépend de la différence d'amplitude des modes plasmons au point où ils se superposent. Dans une structure symétrique, la longueur de la cavité influe directement sur la différence d'amplitude, et donc sur la qualité du signal. En modifiant l'équation {4-5}, on obtient l'estimation suivante.

$$\frac{I_{mod}}{I_0} \cong \frac{\int I_0(\mathbf{r}) \cdot A_{réseaux}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int I_0(\mathbf{r}) \cdot A_{faisceau}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} \cdot \sum_{m \neq 0} C_m \cdot \Omega_{interf} \quad \{ 4-6 \}$$

$$\Omega_{interf} \equiv \frac{I_r + I_m e^{-L_{cav}/L_{decay}} - |I_m e^{-L_{cav}/L_{decay}} - I_r|}{I_m + I_r}$$

Où  $I_r$  et  $I_m$  sont respectivement les intensités des modes plasmons de référence et de mesure au début de leur propagation. Pour cette structure symétrique, l'intensité du mode plasmon de mesure est identique à l'intensité du mode de référence, mais décroît exponentiellement avec la distance. Pour une distance  $L_{cav} = L_{decay}$ , le ratio  $\Omega_{interf}$  sera de  $e^{-1}$ .

En conclusion, l'interféromètre intégré a une sensibilité variable, fonction de la longueur de la cavité ; toutefois, cette augmentation en sensibilité se fait au détriment de la qualité du signal mesurable au champ lointain. Pour une même qualité, la sensibilité augmente avec la longueur d'onde, due à la non-linéarité entre la longueur de propagation et la longueur d'onde.

### 4.3 – Mode 2 – SPR et interférométrie simultanée

L'interférométrie par plasmons de surface peut être utilisée de façon autonome, pour suivre un changement d'indice de réfraction à la surface d'un biodétecteur. Par contre, il est possible de combiner la résonance de plasmon de surface classique avec la mesure interférométrique pour obtenir un nouveau système permettant d'avoir à la fois une mesure de résonance et une mesure interférométrique. Ce mode d'opération double est possible simplement via un changement de la distribution d'indice de réfraction à la surface de l'architecture.

Le système est identique en tous points au précédent, à l'exception de la localisation du changement d'indice de réfraction. En effet, ce dernier n'est plus restreint à la cavité et peut s'étendre à la surface en entier. Expérimentalement, cette situation est plus réaliste et ne requiert pas de moyens physiques pour restreindre les agents biologiques (e.g. canaux microfluidiques). La figure {4.14} met en évidence cette nouvelle distribution spatiale du changement d'indice de réfraction, en comparaison à la situation précédente (voir fig. {4.9}).

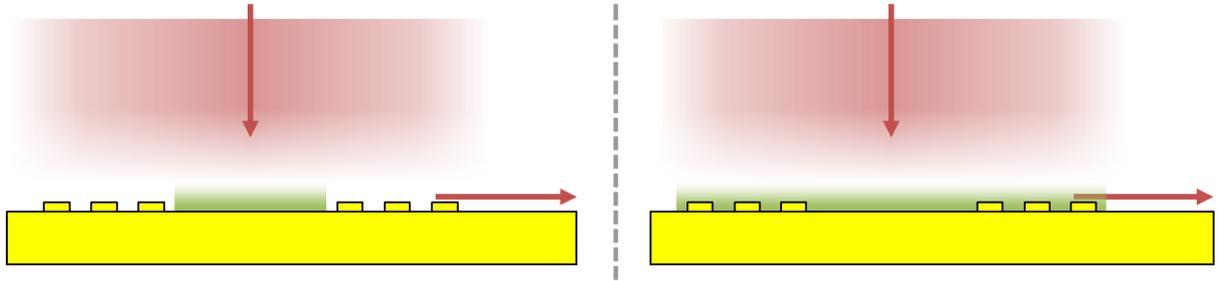


Fig. 4.14 - Distribution spatiale de l'indice de réfraction (zone verte). La figure de gauche représente une distribution du changement d'indice de réfraction confiné à l'intérieur de la cavité, utilisé afin de mettre de l'avant les phénomènes d'interférométrie. La figure de droite illustre le non-confinement du changement d'indice de réfraction, représentant ainsi une surface libre exposée à un agent biologique. Cette seconde situation provoque le déplacement de la résonance des réseaux.

La présence d'un changement d'indice de réfraction au-dessus des réseaux provoque la modification de la réponse spectrale du système. La figure suivante (4.15) met en évidence les deux principaux phénomènes de cette nouvelle réponse spectrale, investigués dans les prochains paragraphes : la constance de la dérive de la résonance pour les architectures, de même que la dérive des modulations interférométriques de pair avec la résonance.

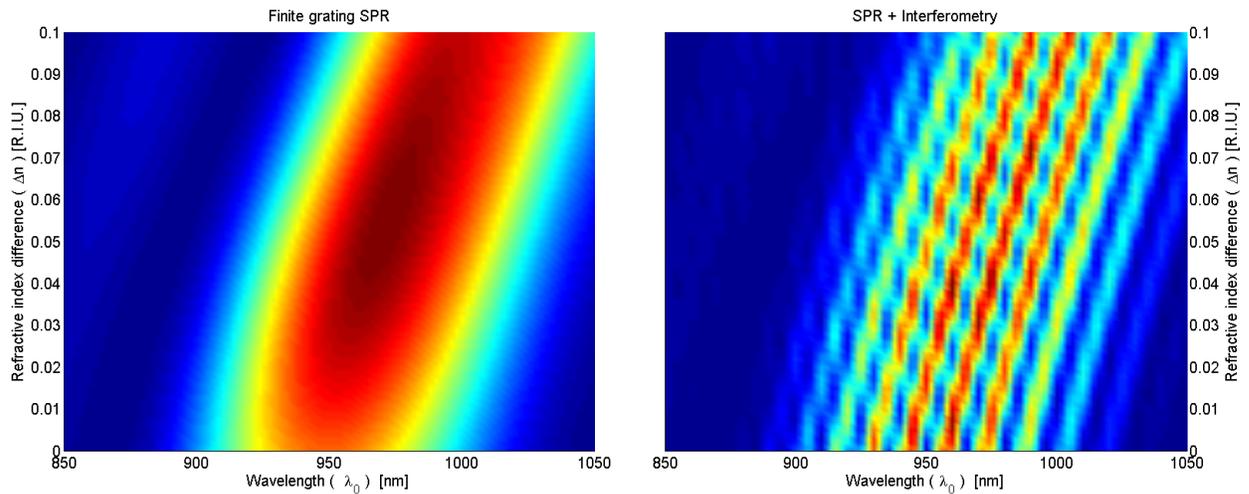


Fig. 4.15 - Comparaison entre le déplacement de la résonance plasmon d'un réseau fini (de longueur NP) et le déplacement de la réponse spectrale d'une architecture interférométrique (2 réseaux fins, aussi de longueur NP, séparés par une cavité de longueur L).

### 4.3.1 - Déplacement de la résonance

La première observation à faire est que la présence d'un changement d'indice de réfraction au-dessus des réseaux provoque la dérive de la résonance liée au couplage des plasmons de surface. Ce phénomène est très clair dans l'image de gauche (4.15), où l'architecture ne présente qu'un seul

réseau fini. Cependant, on remarque que l'enveloppe de la résonance de l'architecture avec les deux réseaux finis et la cavité présente le même déplacement de résonance, malgré les divergences d'architectures. Ceci confirme que la sensibilité du système n'est pas influencée en première approximation par les paramètres de l'architecture interférométrique.

Il est important de noter que la longueur des réseaux n'a d'influence que sur le facteur de qualité de la résonance, et non pas sur la sensibilité du système (les figures de gauche de {4.15} et {4.17}) ; le même changement d'indice de réfraction sur une architecture avec réseau infini va provoquer le même déplacement de la résonance (en énergie ou en vecteur d'ondes) que pour une architecture avec un ou des réseaux finis.

La section [4.3.3] élabore plus en détail sur la combinaison de multiples réseaux et de l'utilité générale de ce type d'architecture versus l'architecture à réseau unique infini.

#### 4.3.2 – Lien entre les conditions d'interférence et la résonance

Le deuxième point à observer sur la figure {4.15} est la forme caractéristique des modulations causées par le phénomène d'interférence dû à la présence de deux réseaux finis. La figure {4.7} et le chapitre [4.2.1] introduisent cet effet de franges, fonction de la longueur du chemin optique de la cavité. Or, dans le cas où la structure est utilisée en mode interférométrique seulement (le changement d'indice est confiné à la cavité), l'augmentation de l'indice de réfraction cause un allongement effectif de la cavité, ce qui cause un déplacement des franges d'interférence relatif à l'enveloppe (voir section [4.2.1]). Il est nécessaire de pouvoir caractériser ce déplacement de franges peu importe le mode de mesure utilisé.

Voici une définition quantitative de ce déplacement de franges. Tout d'abord, il est important de mentionner que l'**onde incidente** qui excite les plasmons sur les réseaux finis n'est pas affectée *a priori* par une variation d'indice de réfraction, puisque ce dernier est confiné à la surface. On décrit la phase relative de l'émission des deux réseaux comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \Delta\psi_I - \Delta\psi_{sp} \\ \text{où } \Delta\psi_{sp} &= k_{sp} \cdot d \\ \Delta\psi_I &= k_I \sin(\theta_I) \cdot d = \frac{d}{\hbar c} \cdot E_I \sin(\theta_I) \end{aligned} \quad \{ 4-7 \}$$

Par la suite, lorsque la surface est exposée à un changement d'indice de réfraction, les conditions de résonance des plasmons de surface changent, décrites par l'équation {4-8} et illustrées à la figure {4.16}; la relation de dispersion est déplacée vers les plus longs vecteurs d'ondes avec l'augmentation de l'indice de réfraction effectif.

$$k'_{sp}(E) = n_{eff}(E) \cdot k_{sp}(E) \quad \{ 4-8 \}$$

Dû au changement d'indice, le chemin optique entre les deux réseaux est lui aussi modifié. La phase relative entre les deux plasmons s'exprime donc maintenant comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \Delta\psi_I - \Delta\psi_{sp}' \\ \text{où } \Delta\psi_{sp}' &= k_{sp}' \cdot d \end{aligned} \quad \{ 4-9 \}$$

Cette équation est la condition d'interférence. Lorsque  $\Delta\psi$  est un multiple de  $2\pi$  (i.e.  $\Delta\psi = 2\pi \cdot m$  où  $m \in \mathbb{Z}$ ), l'interférence est constructive. Cette équation permet de déterminer l'évolution des franges d'interférence sous un changement d'indice de réfraction, en relation avec la résonance de plasmon de surface.

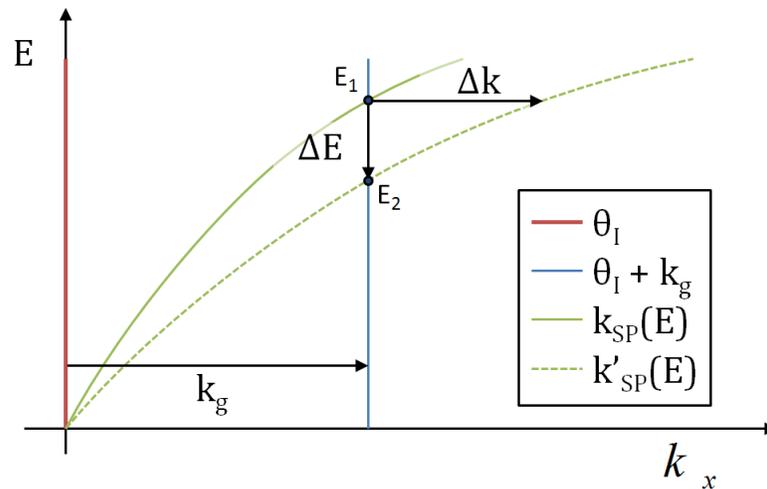


Fig. 4.16 - Déplacement de la relation de dispersion des plasmons de surface avec un changement d'indice de réfraction. Le déplacement de la courbe déplace les conditions de résonances ; à incidence fixe, la résonance se déplace en énergie alors qu'à énergie fixe, la résonance se déplace en vecteur d'onde.

Pour mettre en évidence leur mouvement, il suffit de fixer  $\Delta\psi$  de l'équation {4-9} comme constant pour deux conditions de couplage différentes. En simplifiant l'équation suivante, on obtient :

$$\begin{aligned}\Delta\psi_1 &= \Delta\psi_2 \\ [\Delta\psi_I - \Delta\psi_{sp}]_1 &= [\Delta\psi_I - \Delta\psi_{sp}]_2 \\ \Delta\psi_{sp}|_{2-1} &= \Delta\psi_I|_{2-1}\end{aligned}$$

On remarque que dans tous les cas d'incidence, incluant l'incidence normale, la solution de cette équation décrivant le changement d'énergie ou d'angle des franges correspond à la dérive de la résonance plasmon. Les franges décrivent donc exactement le même déplacement que celui de la résonance de plasmon de surface.

Ceci dit, l'enveloppe causée par la réponse spectrale des réseaux finis vient moduler ces franges, selon le déplacement de la résonance des réseaux. Dans le cas de l'architecture interférométrique, les conditions de couplages sont statiques (i.e. non affecté par le changement d'indice de réfraction). De ce fait, l'enveloppe de la résonance reste immobile, aussi bien en angle qu'en énergie. Les franges vont donc sembler se déplacer par rapport à l'enveloppe.

Toutefois, dans le cas où l'indice de réfraction est déployé sur toute la surface, incluant les réseaux, les conditions de couplage des réseaux vont être modifiées par l'indice de réfraction, causant le déplacement de l'enveloppe selon la résonance de plasmons de surface. On note que les franges vont rester immobiles par rapport à l'enveloppe. Ce phénomène d'interférence est utile dans ce cas-ci, puisque les multiples franges permettent une caractérisation expérimentale supérieure.

### 4.3.3 – Architecture à réseaux multiples

Le phénomène d'interférence induit par la présence de plus d'un réseau fini sur la surface peut être utilisé pour rehausser la qualité et le nombre de résonances. Dans le cas classique où un seul réseau infini est présent à la surface du biodétecteur, une seule condition de résonance est rencontrée, fonction de l'angle et de l'énergie. Cette résonance présente un certain facteur de qualité, fonction de la distance de propagation des plasmons ; la résonance classique est illustrée sur la figure {4.17}. Or, dans le cas d'un réseau fini, cette résonance présente un facteur de qualité beaucoup plus faible, produisant un pic très large et peu défini, comme illustré sur l'image de gauche de la figure {4.15}. Expérimentalement, le facteur de qualité plus faible réduit la précision de la mesure de déplacement de la résonance. Cependant, en juxtaposant à ce premier réseau fini un second réseau, le phénomène d'interférence crée des franges d'interférence. Or, la distance entre ces franges est inversement proportionnelle à la distance entre les réseaux. En distançant ceux-ci, les franges se

resserrent, pour atteindre des largeurs de pics du même ordre de grandeur que dans le cas classique, avec toutefois de nombreux pics présents (voir fig. {4.15}).

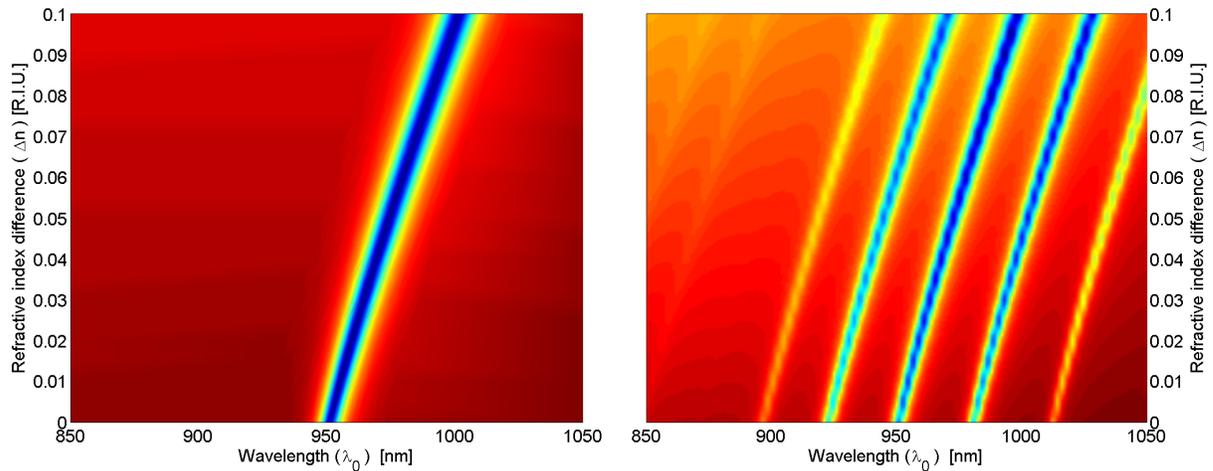


Fig. 4.17 - Illustration du facteur de qualité et de la résonance obtenue via la juxtaposition infinie de systèmes interférométriques. Réponse spectrale d'un réseau infini (gauche) et de la juxtaposition infinie de réseaux finis entrecoupés de cavités de longueur  $L_{decay}/2$  (droite). Les images présentent les **réponses spectrales au champ lointain**, associable à R (voir l'annexe A pour le détail de la mesure).

En augmentant le nombre de réseaux finis sur l'architecture interférométrique, il est possible d'augmenter le facteur de qualité de ces franges. L'image de droite de la figure {4.17} illustre l'augmentation du facteur de qualité des multiples résonances, associable à la diffraction de Fraunhofer pour de multiples fentes (cf. [21], chap. 10.2.3). Il est important de noter que les images de la figure {4.17} représentent la réponse spectrale du système aux champs lointains, illustrant ainsi le point apporté par la section [4.2.5] sur l'observabilité aux champs lointains des effets de modulation interférométriques.

#### 4.4 – Utilité de l'architecture interférométrique

Dans le cadre du design d'un biodétecteur, l'usage d'une architecture interférométrique est définitivement approprié dans le cas où il est adéquat d'employer des canaux microfluidiques, nécessaires à l'architecture. Cette architecture présente un schème de mesure fondamentalement différent à la résonance de plasmon de surface, où il n'est pas nécessaire de suivre l'évolution d'une résonance pour caractériser l'évolution de l'indice de réfraction du système (voir la figure {4.12} et la description dans la section [4.2.4] sous "Sensibilité versus la SPR"). Similairement à la SPR, l'usage de modes plasmons pour effectuer la mesure est une façon ingénieuse de restreindre la mesure

uniquement à une interface. Cependant, la mesure interférométrique de la variation du chemin optique permet une évaluation précise du changement des conditions de surface sans altérer les conditions expérimentales de couplages. De plus, le signal d'intensité pouvant directement être mesuré aux champs lointains, il en découle que le système expérimental est conceptuellement très simple, en comparaison à un système SPR où il est nécessaire de pouvoir suivre la résonance ou à un système polarimétrique où l'appareillage de mesure optique est important.

De plus, les principes d'interférométrie peuvent être appliqués et intégrés à un système de résonance de plasmon de surface classique afin d'accroître ses caractéristiques. En effet, l'ajout de cavités identiques dans le réseau infini génère un patron d'interférence unique additionnel au phénomène de résonance. Or, le patron d'interférence a la caractéristique d'augmenter le nombre de pics de résonance en fonction de la longueur des cavités, mais ces pics de résonances présentent aussi des facteurs de qualité associables à celui de résonance originale. La multiplicité des détails évoluant avec le changement d'indice de réfraction permet l'augmentation de la fiabilité de la mesure, malgré le fait que ces déplacements sont tous essentiellement équivalant au déplacement de la résonance de plasmon fondamentale.

## Conclusion

Le besoin d'outil de diagnostic fiable, peu dispendieux et accessible est très criant dans la communauté médicale. Afin de faire avancer le processus de développement d'un biodétecteur, il est important de faire évoluer de pair les méthodes de mesures. Dans le but d'augmenter la performance de la méthode classique de mesure de la résonance de plasmons de surface, une nouvelle approche a été proposée consistant à faire usage de deux techniques de mesure utilisées conjointement. Cependant, pour procéder à l'intégration de ces diverses méthodes entre elles, il est toutefois nécessaire que ces éléments soient développés de façon à être fondamentalement compatibles.

C'est dans cette optique qu'a été développée une **architecture interférométrique complètement intégrée**, basée sur une simple microfabrication d'une interface métal-diélectrique et fonctionnant à partir de la propagation de plasmons de surface. Ces restrictions s'avèrent nécessaires afin de respecter les critères de fabrication et de distribution établis par la prémisse du projet : le développement d'un biodétecteur complètement intégré pour être compatible avec l'architecture monolithique de la plateforme SPR déjà existante.

La combinaison intrinsèque d'une mesure interférométrique avec une mesure de résonance permet la création de caractéristiques précises dans la réponse spectrale du biodétecteur, un patron d'interférence multiplexé à la résonance. Malheureusement, il a été démontré que ces caractéristiques ne provoquent pas de façon inhérente une augmentation en sensibilité, qui aurait été possible par une réponse au changement d'indice fonction d'un paramètre architectural. Néanmoins, le patron lui-même est fonction d'un tel paramètre, et la forme même du patron peut être utilisée pour **augmenter expérimentalement la précision de la mesure**, via la redondance de l'information de résonance. En développant les méthodes d'analyses suffisamment, cette redondance pourra permettre la réduction significative des erreurs d'origine expérimentale. De ce fait, le gain d'une telle combinaison s'avère être plus axé sur le renforcement de la fiabilité et de la précision de la mesure plutôt que sur l'augmentation brute de la sensibilité.

La prochaine étape de cette recherche consistera à élaborer les restrictions physiques d'un tel système interférométrique et d'en faire la démonstration expérimentale. De nombreuses améliorations pourront être apportées dans l'optique d'optimiser la qualité de la modulation et les longueurs de propagations ou d'améliorer le couplage. Toutefois, l'objet de plus grand intérêt sera la

**démonstration de l'interférométrie hyperspectrale**, où la multiplicité de l'information de résonance permettra une caractérisation hautement supérieure à la SPR classique.

Fondamentalement, malgré l'ajout de caractéristiques très utiles par la fabrication d'une microstructure à la surface du biodétecteur, la sensibilité inhérente de la résonance de plasmon de surface reste inchangée ; la sensibilité de cette technique reste limitée dans ce cas-ci par les moyens expérimentaux. Cependant, cette nouvelle multiplicité d'information apportée par l'interférométrie a non seulement permis d'augmenter la précision sur la mesure expérimentale, mais elle a aussi mis en évidence une nouvelle voie d'exploration : utiliser le concept de redondance pour faire un recoupement et une auto-vérification des mesures acquises. C'est pourquoi il est important de se questionner sur la conceptualisation des biodétecteurs et les façons d'augmenter la fiabilité plus que la sensibilité.

Au final, les biodétecteurs devront répondre aux besoins d'accessibilité et de confiance du marché avant de pouvoir percer et de vraiment changer le paradigme de l'exercice de la médecine moderne.

## Annexe A – Détails des simulations

Cette annexe donne les détails des simulations FEM. La section 7.1 traite des paramètres généraux (constantes, fonctions). La section 7.2 traite des diverses architectures utilisées tout au long du mémoire et de leurs paramètres spécifiques (conditions aux frontières, protocole de mesure). Chaque architecture réfère à la section où il est question de cette expérience. La section 7.3 traite les cas spéciaux, où d'avantages de détails sont nécessaires.

### A.1 – Paramètres généraux

De façon générale, toutes les simulations décrites ci-dessous utilisent les mêmes paramètres de base. Le mode d'application de la simulation est "*TM In-Plane Waves*". Le type d'analyse est la propagation harmonique ("*Harmonic Propagation*") et les éléments finis ("*mesh elements*") sont distancés de façon telle à ce qu'il y ait au minimum de 10 à 15 éléments par longueur d'onde ; dans un domaine d'indice de réfraction "n", la quantité d'éléments est augmenté du même ratio "n".

Tous les modèles sont définis avec le même gabarit, les mêmes éléments de bases : les constantes ( $\theta, c, \lambda_0, n_c$ ), les constantes dérivées ( $k_0, k_x$ ), les constantes spécifiques aux domaines ( $k_y = \sqrt{k_i^2 - k_x^2}$ ) et les fonctions d'indices de réfraction complexes ( $n_i(E)$  où  $i$  représente les différents matériaux). Les fonctions des indices utilisés sont tabulées plus bas. Les PML (couche absorbante à impédance parfaitement adaptée) sont laissées avec les paramètres par défaut, sauf les PML latérales, où il doit y avoir absorption de plasmons de surface. Dans ces cas-là, la longueur d'absorption dans la direction de propagation des plasmons est définie à " $\lambda_{S\_rfwh}$ " (le " $\_rfwh$ " représente le nom de code du mode d'application) afin d'éviter les réflexions.

Les conditions périodiques de Floquet sont toujours configurées avec le  $k_x$  de l'onde incidente. Les conditions de diffraction ("*Scattering Boundary Condition*") émettrice sont configurées pour l'émission d'une onde plane avec comme vecteur d'onde  $k_x$  et  $k_y$ .

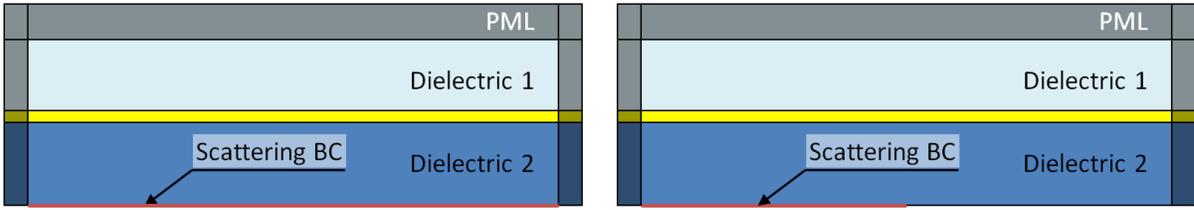
## A.2 – Architectures utilisées

### A.2.1 – Architectures à réfraction simple

|  |  |
|--|--|
|  | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Expérience : Réfraction simple ([2.1.1])</li> <li>- Diélectrique 1 : SiO<sub>2</sub></li> <li>- Diélectrique 2 : Air</li> <li>- Analyse : balayage sur l'angle d'incidence [0,90°] (<math>k_x</math> correspondants dans le milieu incident)</li> <li>- Mesure : Intégration sur la frontière supérieure de "atan2(Poxav_rfweh,Poyav_rfweh)"</li> </ul> |
|  | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Expérience : Réfraction TIR ([2.1.2])</li> <li>- Diélectrique 1 : Air</li> <li>- Diélectrique 2 : SiO<sub>2</sub></li> <li>- Analyse : balayage sur l'angle d'incidence [0,90°] (<math>k_x</math> correspondants dans le milieu incident)</li> <li>- Mesure : Intégration sur la frontière supérieure de "atan2(Poxav_rfweh,Poyav_rfweh)"</li> </ul>    |

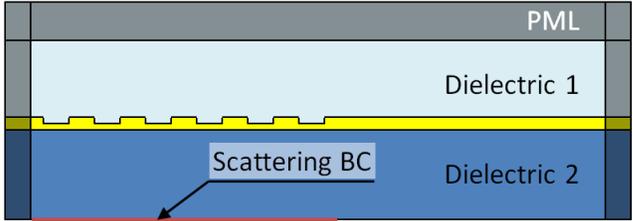
### A.2.2 – Architectures SPR sans diffraction

|  |  |
|--|--|
|  | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Expérience : Réfraction TIR + SPR ([2.1.3])</li> <li>- Diélectrique 1 : Air</li> <li>- Métal : Or</li> <li>- Diélectrique 2 : SiO<sub>2</sub></li> <li>- Analyse : balayage sur l'angle d'incidence [0,90°] (<math>k_x</math> correspondants dans le milieu incident)</li> <li>- Mesure : Intégration sur la frontière supérieure de "atan2(Poxav_rfweh,Poyav_rfweh)"</li> <li>- Mesure : Carte du champ "abs(scHz)"</li> </ul> |
|--|--|

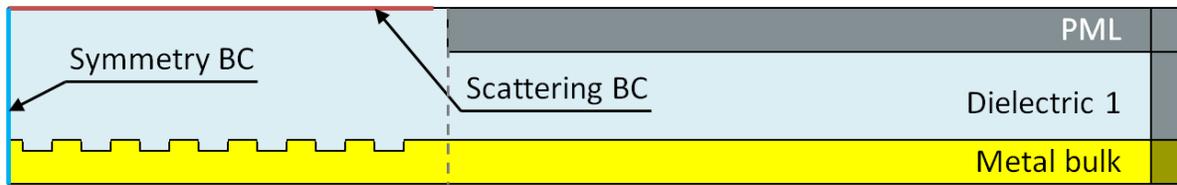


- Expérience : Évanescence vs Mode optique ([2.2.1]) ; on note la restriction de la zone émettrice dans la seconde simulation afin d'avoir un profil spatial de faisceau incident fini.
- Diélectrique 1 : Air
- Métal : Or / Absence de métal dans la démonstration d'évanescence.
- Diélectrique 2 : SiO<sub>2</sub>
- Analyse : Statique, à angle d'incidence et énergie fixe. L'angle d'incidence est l'angle de résonance.
- Mesure : Coupe du champ "abs(Hz)" à 1nm au dessus de la surface du métal (ou du diélectrique 2 en l'absence de métal), dans le diélectrique 1.

### A.2.3 – Architecture SPR avec réseau fini sans cavité

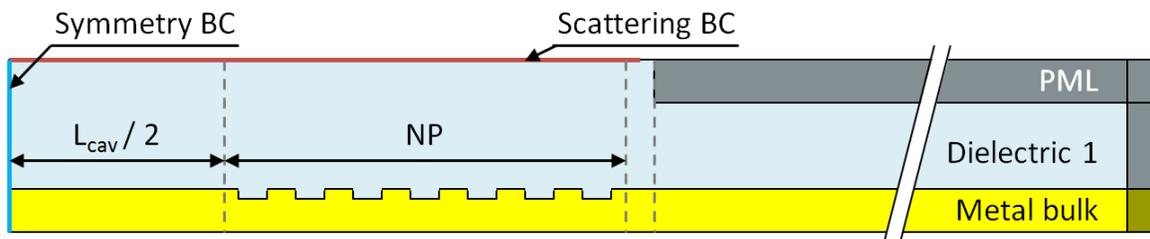


- Expérience : 0<sup>ième</sup> vs 1<sup>er</sup> ordre de diffraction ([2.2.2]) ; on note la restriction de la zone émettrice afin d'avoir un profil spatial de faisceau incident fini.
- Diélectrique 1 : Air
- Métal : Or
- Diélectrique 2 : SiO<sub>2</sub>
- Analyse : Statique, à angle d'incidence et énergie fixe. L'angle d'incidence est normal à l'interface dans le cas où le couplage se fait par le 1<sup>er</sup> ordre de diffraction ou est égal à l'angle de résonance dans le cas où le couplage se fait par le 0<sup>ième</sup> ordre de diffraction.
- Mesure : Coupe du champ "abs(Hz)" à 1nm au dessus de la surface du métal.



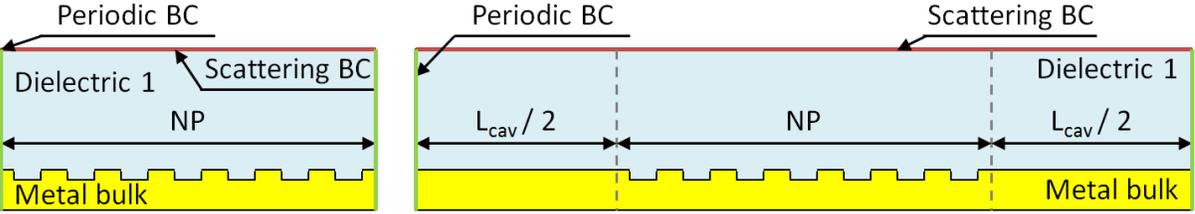
- Expérience : Mesure et comparaison du vecteur d'onde complexe simulé avec la théorie ([2.3.2])
- Diélectrique 1 : Air
- Métal : Or
- Analyse : Statique, à angle d'incidence normal et énergie variable. La périodicité du réseau est ajustée pour correspondre approximativement au vecteur d'onde plasmon pour chaque énergie, afin d'autoriser un couplage efficace par le 1<sup>er</sup> ordre de diffraction.
- Mesure : Coupe du champ complexe " $H_z$ " à 1nm au dessus de la surface du métal, à partir de la ligne pointillée. Le vecteur d'onde réel est déterminé par la transformée de Fourier de la coupe du champ et la décroissance est évaluée avec la régression non-linéaire d'une fonction exponentielle sur la décroissance de l'intensité du champ (" $H_z \cdot \overline{H_z}$ ").

#### A.2.4 – Architecture SPR avec réseaux finis et cavité



- Expérience : Toutes les expériences à cavité unique (tout le chapitre 4, sauf [4.3.3])
- Diélectrique 1 : Air
- Métal : Or
- Analyse : Statique, à angle d'incidence normal et énergie variable. La périodicité du réseau est ajustée dans certains cas pour correspondre approximativement au vecteur d'onde plasmon pour chaque énergie, afin d'autoriser un couplage efficace par le 1<sup>er</sup> ordre de diffraction. Dans d'autres cas, le réseau est conservé fixe afin d'évaluer la réponse spectrale.
- Mesure : Intégration du flux d'énergie à travers la frontière supérieure (" $nPoav\_rfwh$ ") afin d'évaluer l'intensité de la réflexion et l'observabilité au champ lointain.
- Mesure : Intégration du flux d'énergie (" $nPoav\_rfwh$ ") dans le métal le long de l'interface, à l'extrême droite de la zone de simulation, un peu avant la PML.

### A.2.5 – Architecture avec réseau infini ou réseau infini de cavités



- Expérience : Réseau infini et juxtaposition infinie de système interférométrique ([4.3.3]) ; on note les frontières périodiques conventionnelles.
- Diélectrique 1 : Air
- Métal : Or
- Analyse : Statique, à angle d'incidence normal et énergie variable. La périodicité du réseau est conservée fixe afin d'évaluer la réponse spectrale.
- Mesure : Intégration du flux d'énergie à travers la frontière supérieure ("nPoav\_rfwh").

## A.3 – Cas spéciaux

### A.3.1 – Indices de réfraction

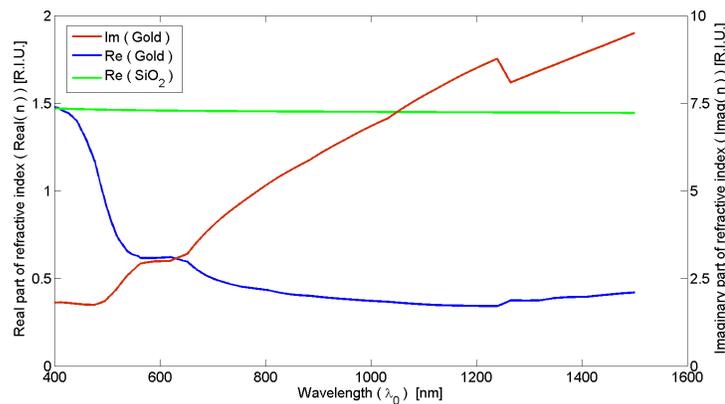


Fig. A.1 - Courbes décrivant les indices de réfraction utilisés pour les simulations FEM de ce mémoire.

### A.3.2 – Contenu en fréquence

L'image {2.5} illustre le couplage d'une onde incidente sur une architecture présentant une couche mince de métal. Or, sur une partie de cette couche se trouve un réseau pour permettre en addition au couplage par évanescente, le couplage par diffraction. Voici l'analyse détaillée de cette image. Pour simplifier, cette dernière est reproduite ci-dessous.

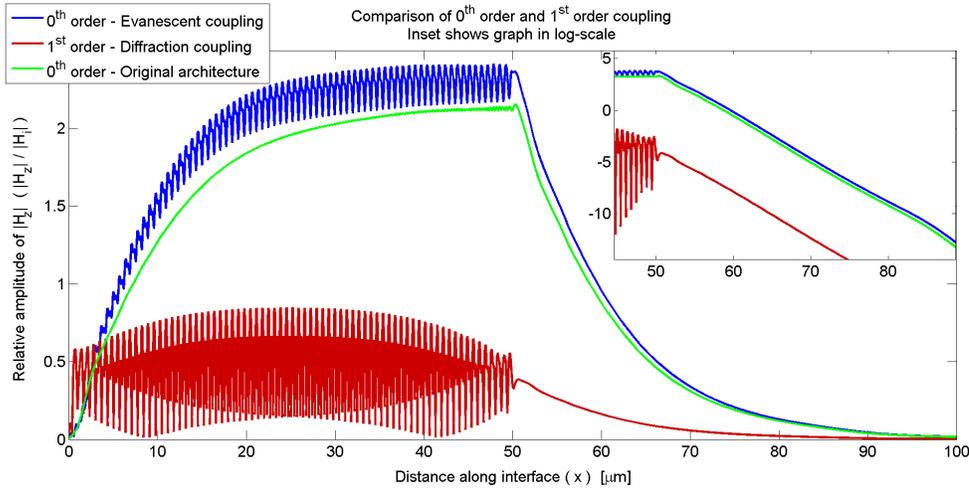


Fig. A.2 - Reproduction de l'image {2.5}, comparant les couplages par évanescence et par diffraction (ordre 0 et 1 de diffraction, respectivement).

Les coupes transversales de la norme des champs présentent des modulations (courbes bleu et rouge, entre 0 et  $50\mu m$ ). Afin de déterminer la nature de ces modulations, il est possible de décomposer ces champs dans leurs composantes spectrales, via une transformée de Fourier (FFT). La transformée de ces champs complexe dans la zone présentant ces modulations nous donne l'image suivante {A.3}.

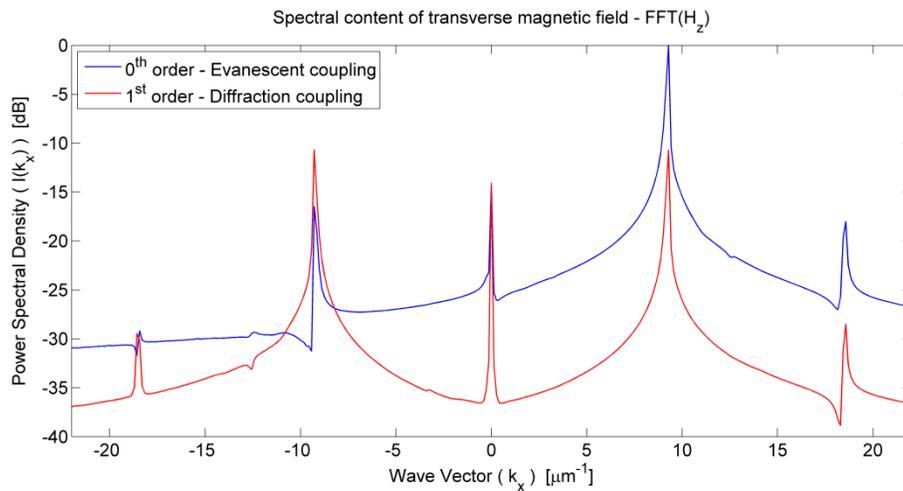


Fig. A.3 - Densité spectrale des signaux harmoniques de la figure {A.2}, entre 0 et  $50\mu m$ .

On remarque tout d'abord la netteté des transformées, signifiant l'absence de bruit dans le signal harmonique. Ensuite, les pics ont été clairement identifiés comme étant des ordres de diffractions de l'onde incidente. Par exemple, la courbe associée au couplage évanescent (courbe bleu) possède un pic majeur à  $k_{sp}$ ; ce pic correspond au vecteur d'onde de l'onde incidente qui est couplé au mode

plasmon. Par contre, dû à la présence du réseau (de vecteur d'onde  $k_g = k_{sp}$ ), il y a une forte diffraction aux ordres -1 et -2, correspondant respectivement à une transmission dans l'air à 0 degré ( $k_x = 0$ , propagation normale à l'interface) et à un plasmon se propageant de façon rétrograde à l'onde incidente ( $k_x = -k_{sp}$ ). La combinaison de ces composantes spectrales forme les modulations dans l'amplitude de la norme du champ magnétique transverse.

Le même processus de réflexion s'applique pour la courbe associée au couplage par diffraction (courbe rouge). Le pic principal se trouve à  $k_x = 0$ , ce qui signifie une transmission normale à l'interface. Les pics à  $\pm k_{sp}$  représentent le couplage entre l'onde incidente et les modes plasmons via le premier ordre de diffraction. La forme caractéristique des modulations est explicable comme suit. De par la condition à la frontière absorbante (à l'extrême gauche de l'architecture), le réseau émulé est un réseau fini allant de 0 à  $50\mu m$ . Le mode plasmon se propageant selon  $+k_{sp}$  est graduellement excité par l'onde incidente, de 0 à  $25\mu m$ , où il sature partiellement (dû à la longueur caractéristique de décroissance d'environ  $25\mu m$ ; cette croissance est illustrée par la croissance du mode sur la courbe bleue de la figure {A.2}). Inversement, le mode plasmon se propageant selon  $-k_{sp}$  est graduellement excité par l'onde incidente de 50 à  $25\mu m$ , où lui aussi sature partiellement (pour les mêmes raisons). Or, les deux plasmons voyageant en sens opposés vont créer une onde stationnaire, fonction de l'intensité des deux modes. La modulation va être maximale là où les deux modes possèdent la même intensité, c'est-à-dire à au centre du réseau fini, à  $x = 25\mu m$ .

Finalement, la disparition de ces composantes (pour les deux courbes) dans la section sans réseau est une autre preuve qui appui la conclusion que les modulations sont causées par l'interférence des différents modes de diffractions.



## Annexe B – Analyse de Fourier

### B.1 – Réponse spectrale d'un réseau fini

Formellement, il est possible d'exprimer la fonction de couplage d'un réseau infini en utilisant sa représentation dans l'espace réciproque (cf. [28], chapitre 2.3). En utilisant l'analyse de Fourier, on exprime tout d'abord un réseau infini comme suit, dans l'espace réel.

$$f(x) = s(x) * \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nP) \quad \{ B-1 \}$$

La distribution représentant un réseau périodique est la somme infinie de fonctions de Dirac également espacées avec la périodicité  $P$ . Ce peigne de Dirac est ensuite convolué avec la forme de la période, représenté ici par  $s(x)$ . Par exemple, cette dernière pourrait être une fonction rectangle, une fonction triangle ou une période d'un cosinus. En effectuant la transformée de Fourier de cette représentation, on obtient l'équation suivante.

$$\hat{f}(k) = \hat{s}(k) \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k - mk_g) \quad \{ B-2 \}$$

où  $k_g = \frac{2\pi}{P}$

Dans l'espace réciproque, le réseau périodique infini est aussi représenté par un réseau infini, avec toutefois une périodicité inversement proportionnelle à la périodicité originale. Ces différents pics de Dirac représentent les ordres de diffractions du réseau (i.e.  $mk_g$ ). On remarque que la forme de la périodicité du réseau dans l'espace réel  $s(x)$  n'a qu'un effet de modulation sur les différents pics de diffractions dans l'espace réciproque, via la multiplication du peigne de Dirac réciproque par la transformée de  $s(x)$ , par  $\hat{s}(k)$ .

Afin de représenter la finitude du réseau, il suffit de multiplier celui-ci dans l'espace réel par une fonction rectangle. Or, dans l'espace réciproque, ceci se traduit par la convolution d'un sinus cardinal (transformée de la fonction rectangle) avec la représentation réciproque du réseau infini.

$$\hat{h}(k) = \hat{g}(k) * \left[ \hat{s}(k) \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k - mk_g) \right]$$

où  $g(x) = \text{rect}\left(\frac{x}{NP}\right)$  { B-3 }

$$\hat{g}(k) = \text{sinc}\left(\frac{kN}{k_g}\right)$$

Cette équation réciproque complète exprime la diffraction du réseau fini dans l'espace des vecteurs d'ondes. Toutefois, notre intérêt ici se limite à **mettre en évidence la finalité du réseau** ; en conséquence, seul l'effet du sinus cardinal peut-être considéré. Il en résulte la négligence de la forme de la période du réseau, qui peut être effectué sans altérer l'interprétation faite ici. L'intensité de la diffraction s'exprime donc par l'intensité de la transformée de Fourier, que l'on approxime ici à :

$$I_{diff} = \hat{g}(k) \cdot \overline{\hat{g}(k)} \quad \{ B-4 \}$$

L'image de droite de la figure {B.1} illustre l'intensité de la transformée de Fourier d'une fonction rectangle aux dimensions correspondant à celles utilisées en simulations (image de gauche de la même figure). On remarque toutefois qu'afin de produire la réponse spectrale de la fonction rectangle en énergies au lieu d'en vecteur d'onde, la démarche suivante est requise.

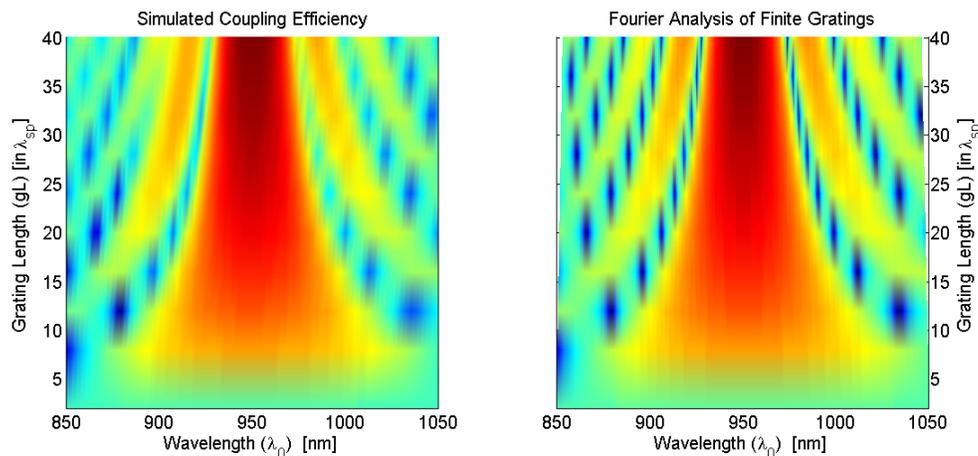


Fig. B.1 - Comparaison entre la réponse spectrale d'un réseau fini de nombre de périodes  $gL$ . À gauche sont représentés les résultats de simulations FEM et à droite les résultats d'un calcul basé sur l'analyse de Fourier. L'échelle d'intensité est logarithmique afin de faire ressortir les détails des lobes secondaires. Les détails perçus entre les lobes sont artificiels, causés par la limite en résolution de la simulation FEM et reproduits par la même résolution des calculs.

## B.2 – Équivalence entre les réponses spectrales en "k" et en "E"

Le couplage entre la lumière incidente et les plasmons de surface dans une architecture semi-infini se produit selon la relation suivante pour un réseau infini.

$$m \cdot k_g + k_\theta = k_{sp} \quad \{ B-5 \}$$

où  $mk_g$  représente le peigne de Dirac

En considérant un réseau fini, " $mk_g$ " n'est plus restreint à des entiers uniques ; la fonction de couplage est la résultante de la convolution entre la réponse du réseau infini (un peigne de Dirac aux ordres de diffraction correspondant à  $mk_g$ ) et la réponse de la finalité du réseau (le sinus cardinal). On exprime donc le couplage avec une contribution supplémentaire de  $\Delta_k$ .

$$(m \cdot k_g + \Delta_k) + k_\theta = k_{sp} \quad \{ B-6 \}$$

$$\text{où } k_{sp} = \frac{\omega}{c_0} \cdot \left( \frac{\epsilon_1 \cdot \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^{1/2}$$

En utilisant un développement en séries de Taylor, on met en évidence la relation entre  $\Delta_k$  et  $\Delta_\omega$  ; on exprime l'approximation linéaire comme suit.

$$\begin{aligned} mk_g + \Delta_k &= k_{sp}(\omega + \Delta_\omega) + k_\theta(\omega + \Delta_\omega) \equiv f(\omega + \Delta_\omega) \\ &= T\{f(\omega + \Delta_\omega)\} = f(\omega)|_{\omega_0} + \Delta_\omega f'(\omega)|_{\omega_0} + \mathcal{O}(2) \end{aligned} \quad \{ B-7 \}$$

Graphiquement, la courbe de diffraction est projetée sur la relation de dispersion des plasmons de surface pour en obtenir l'équivalence en énergie.

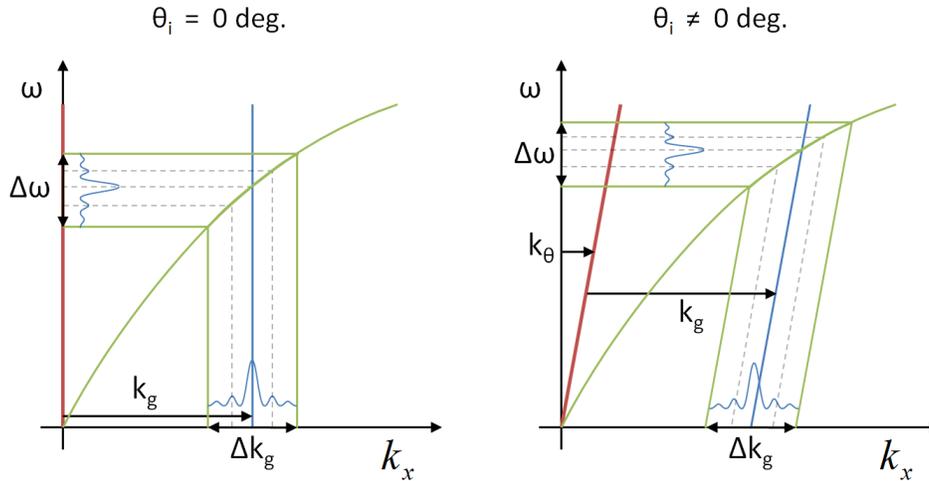


Fig. B.2 - Représentation de la transformation non-linéaire de la réponse spectrale du couplage plasmon d'un réseau fini. La transformation permet de passer de la réponse spectrale en vecteur d'onde à la réponse spectrale en énergie, et inversement. On remarque la déformation de la fonction suite à la transformation non-linéaire. Il est important de remarquer qu'expérimentalement, la mesure se fait généralement à énergie fixe ou à angle d'incidence fixe (avec une architecture évidemment statique). À énergie fixe, la réponse spectrale sera directement la réponse en vecteur d'onde (non-illustré ici), alors qu'à angle fixe, la réponse spectrale sera la réponse en énergie, résultante de la transformation soulignée ici.

En utilisant cette relation pour exprimer la diffraction du réseau en énergie plutôt qu'en vecteur d'onde, il est possible de comparer les largeurs de réponses spectrales obtenues analytiquement et via les simulations FEM (voir la figure {B.1}). On observe la forte correspondance attendue. On peut donc conclure qu'il est possible de représenter la réponse spectrale d'un réseau fini avec la simple transformée de Fourier de la fonction représentant l'amplitude de celui-ci.

### B.3 – Réponse spectrale de deux réseaux finis

De la même façon qu'a été démontré la correspondance entre la réponse spectrale d'un réseau fini et la transformée de Fourier de la fonction décrivant son amplitude (la fonction rectangle), il est possible de refaire le même exercice ici. La fonction de base décrivant toujours les réseaux individuellement est encore la fonction rectangle. La distance entre les deux fonctions correspond à la longueur de la cavité. La nuance ici est leur amplitude relative. En effet, les plasmons de surface ont une extension spatiale finie, due à leur décroissance exponentielle. Pour émuler l'influence exponentiellement croissante du second réseau au fur et à mesure qu'il se rapproche, l'amplitude de la fonction rectangle de ce second réseau est modulée du même facteur exponentiel de propagation des plasmons. Le schéma suivant illustre cette relation.

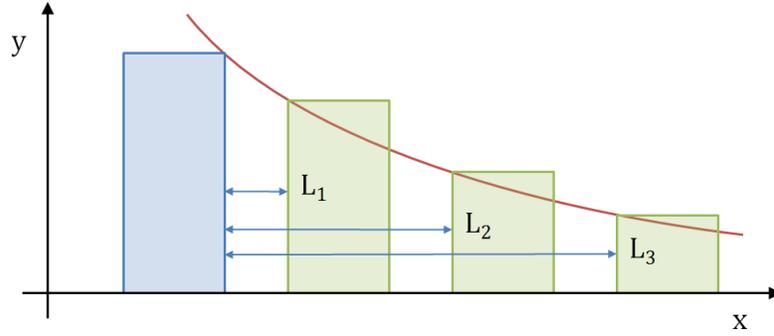


Fig. B.3 - Illustration du changement d'amplitude appliqué sur le second réseau afin d'émuler l'influence spatiale finie des plasmons de surface. On note ici que pour faciliter les calculs, le point de référence  $x = 0$  est toujours positionné à mi-cavité ; dans un but de clarté, l'axe  $y$  n'est représenté qu'à gauche de l'image.

Mathématiquement, en se basant sur l'équation {B-3}, on exprime la réponse spectrale d'un réseau fini comme suit.

$$\hat{h}(k) = \hat{g}(k) * \hat{f}(k)$$

En redéfinissant  $g(x)$ :

$$g'(x) = \left[ g\left(x - \frac{A}{2}\right) + B \cdot g\left(x + \frac{A}{2}\right) \right] \quad \text{{ B-8 }}$$

$$\text{où } A = L + NP$$

$$B = e^{-x \cdot L / L_{decay}}$$

$$\hat{g}'(k) = (e^{iAk/2} + B e^{-iAk/2}) \cdot \hat{g}(k) \quad \text{{ B-9 }}$$

En vérifiant l'intensité de la diffraction, on remarque que celle-ci est modulée par un cosinus, donc la période est fonction de la longueur de la cavité, et dont l'amplitude tend vers 0 lorsque la longueur tend vers l'infini.

$$\begin{aligned} I_{diff} &= \hat{g}'(k) \cdot \overline{\hat{g}'(k)} \\ &= [1 + B^2 + 2B \cos(Ax)] \hat{g}(k) \cdot \overline{\hat{g}(k)} \end{aligned} \quad \text{{ B-10 }}$$

Dans la figure {B.4}, la seconde image présente la transformée de Fourier de ce système, avec la modification de la longueur de la cavité. La ressemblance avec les résultats de simulations est définitivement frappante. Une nuance importante de l'analyse de Fourier a toutefois été négligé ; seule l'enveloppe du réseau a été considérée (la fonction rectangle définissant la finalité du réseau).

Cette approximation est valide pour observer le comportement "macroscopique"<sup>7</sup> du système (à un ou deux réseaux).

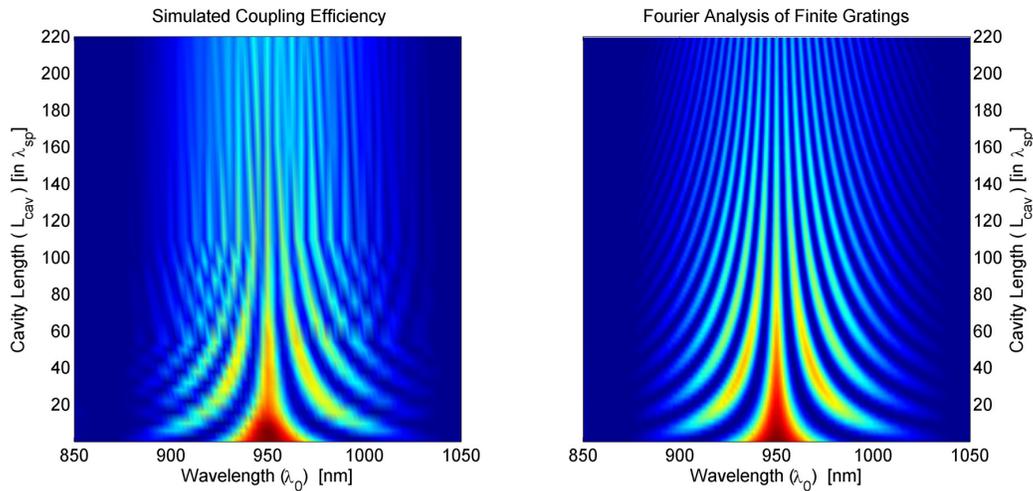


Fig. B.4 - Comparaison entre la réponse spectrale de deux réseaux finis séparés d'une longueur  $L_{cav}$ . À gauche sont représentés les résultats de simulations FEM et à droite les résultats d'un calcul basé sur l'analyse de Fourier.

Toutefois, ce comportement considère une fonction sous-jacente de réseau infini, sur lequel l'enveloppe est appliquée. Les fenêtres de l'enveloppe (les deux fonctions rectangles représentant les deux réseaux) sont appliquées directement sur le réseau infini par multiplication ; avec cette analyse, les deux réseaux sont donc toujours synchrones entre eux. La figure {B.5} illustre cette situation.

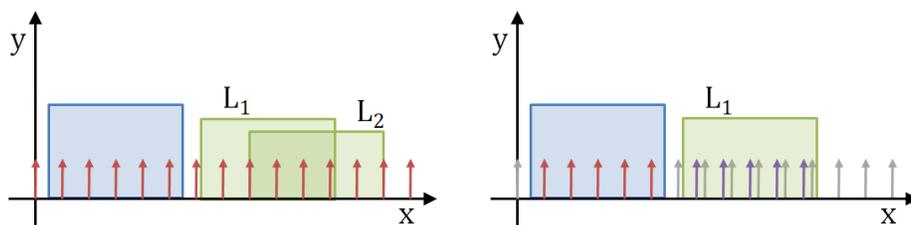


Fig. B.5 - Considération de la phase relative des réseaux. La figure de gauche est l'illustration de l'application des fenêtres directement sur le réseau infini ; les réseaux finis ainsi générés seront toujours en phases entre eux, peu importe la longueur de la cavité. La figure de droite illustre la conséquence de réseaux finis toujours centrés sur leur fenêtre respective. Le second réseau se trouve déphasé par rapport premier réseau fini pour des longueurs de cavités qui ne sont pas un facteur entier de la périodicité.

Dans le cas où les réseaux sont toujours synchrones peu importe la longueur de la cavité, les plasmons émis par ces réseaux seront en phase. Or, pour bien représenter la situation réelle, les

<sup>7</sup> Macroscopique signifie une variation de longueur de cavité multiple de la périodicité du réseau sous-jacent.

réseaux se déplacent avec la longueur de cavité au lieu d'être simplement le déplacement des fenêtres sur le même réseau infini (voir figure {B.5}). En tenant compte de ces différences de phase et en appliquant numériquement ces résultats, on retrouve le phénomène d'interférence pour un  $\lambda_0$  fixe et une longueur de cavité variable.



## Références

1. *Label-Free Biosensors - Techniques and Applications*, ed. M.A. Cooper. 2009: Cambridge University Press. 300.
2. <http://www.biacore.com/lifesciences/history/index.html>.
3. Rich, R.L. and D.G. Myszka, *Survey of the year 2006 commercial optical biosensor literature*. Journal of Molecular Recognition, 2007. **20**(5): p. 300-366.
4. Rich, R.L. and D.G. Myszka, *Survey of the year 2007 commercial optical biosensor literature*. Journal of Molecular Recognition, 2008. **21**(6): p. 355-400.
5. Naimushin, A.N., et al., *Detection of Staphylococcus aureus enterotoxin B at femtomolar levels with a miniature integrated two-channel surface plasmon resonance (SPR) sensor*. Biosensors and Bioelectronics, 2002. **17**(6-7): p. 573-584.
6. Lepage, D. and J.J. Dubowski, *Surface plasmon assisted photoluminescence in GaAs-AlGaAs quantum well microstructures*. Applied Physics Letters, 2007. **91**(16): p. 163106-3.
7. Lepage, D. and J.J. Dubowski, *Surface plasmon effects induced by uncollimated emission of semiconductor microstructures*. Opt. Express, 2009. **17**(12): p. 10411-10418.
8. Ho, H.P., et al., *Sensitivity enhancement based on application of multi-pass interferometry in phase-sensitive surface plasmon resonance biosensor*. Optics Communications, 2007. **275**(2): p. 491-496.
9. Kabashin, A.V., S. Patskovsky, and A.N. Grigorenko, *Phase and amplitude sensitivities in surface plasmon resonance bio and chemical sensing*. Opt. Express, 2009. **17**(23): p. 21191-21204.
10. Li, Y.-C., et al., *Differential-Phase Surface Plasmon Resonance Biosensor*. Analytical Chemistry, 2008. **80**(14): p. 5590-5595.
11. Patskovsky, S., et al., *Self-noise-filtering phase-sensitive surface plasmon resonance biosensing*. Opt. Express, 2010. **18**(14): p. 14353-14358.
12. Wu, S.Y., et al., *Highly sensitive differential phase-sensitive surface plasmon resonance biosensor based on the Mach-Zehnder configuration*. Opt. Lett., 2004. **29**(20): p. 2378-2380.
13. Robert, P., A. Rey, and J. Rey-Debove, *Le nouveau Petit Robert : dictionnaire alphabétique et analogique de la langue française*. 2010, Dictionnaires Le Robert: Paris.
14. *Encyclopaedia Universalis*. 2010, Encyclopaedia Britannica, <http://www.universalis-edu.com/>.
15. Ding, X., et al., *Immobilization of avidin on (001) GaAs surface*. Applied Physics A: Materials Science & Processing, 2006. **83**(3): p. 357-360.

16. Länge, K., B. Rapp, and M. Rapp, *Surface acoustic wave biosensors: a review*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2008. **391**(5): p. 1509-1519.
17. Hunt, W.D., et al., *Clues from digital radio regarding biomolecular recognition*. IEEE Transactions on Biomedical Circuits and Systems, 2007. **1**(1): p. 50-5.
18. McKendry, R., et al., *Multiple label-free biodetection and quantitative DNA-binding assays on a nanomechanical cantilever array*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2002. **99**(15): p. 9783-9788.
19. Carrier, D., *A study of Orthogonality - Observations for reliability enhancement in biosensing*. 2008, Université de Sherbrooke: Sherbrooke. p. 23.
20. Raether, H., *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings (Springer Tracts in Modern Physics)*. 1988: Springer.
21. Hecht, E., *Optics*. 4th ed. 2002: Addison-Wesley.
22. Palik, E.D., *Handbook of optical constants of solids*. 1985, Orlando: Academic Press.
23. Thèye, M.-L., *Investigation of the Optical Properties of Au by Means of Thin Semitransparent Films*. Physical Review B, 1970. **2**(8): p. 3060.
24. *RF Module User's Guide for COMSOL 3.5a*. 2008, Comsol.
25. Patskovsky, S., et al., *Mechanical modulation method for ultrasensitive phase measurements in photonics biosensing*. Opt. Express, 2008. **16**(26): p. 21305-21314.
26. Bozhevolnyi, S.I., et al., *Channel plasmon subwavelength waveguide components including interferometers and ring resonators*. Nature, 2006. **440**(7083): p. 508-511.
27. Drezet, A., et al., *Surface Plasmon Polariton Mach-Zehnder Interferometer and Oscillation Fringes*. Plasmonics, 2006. **1**(2): p. 141-145.
28. Cowley, J.M., *Diffraction Physics*. 3rd ed. North-Holland personal library. 1995: Elsevier.