

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIR MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOUBEKR BELKAID-TLEMCEN FACULTE DES SCIENCES DEPARTEMENT DE PHYSIQUE LABORATOIRE DE PHYSIQUE THEORIQUE

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de Docteur

Spécialité : Physique de la matière condensée

Présentée par

BENATALLAH Mohammed

Sujet de thèse

Modélisation de la propagation de la lumière dans un bio-senseur optique à semi-conducteur

Soutenu le 03 Décembre 2015, devant les membres de Jury :

Mr	Mostépha LEMERINI	Professeur, U. Tlemcen	Président
Mr	Benamar BOUHAFS	Professeur, U. Tlemcen	Directeur de Thèse
Mr	Boumèdiène LASRI	Professeur, U. de Saida	Rapporteur externe
Mr	Mourad MAHBOUB	Professeur, U. Tlemcen	Rapporteur interne
Mr	Ghouti BASSOU	Professeur, U. Sidi Bellabes	Rapporteur externe

Année universitaire 2014/2015

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au sein du Laboratoire de physique théorique (LPT) de la Faculté des sciences de l'université ABOU BEKR BELKAID – TLEMCEN- ALGERIE.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur Benamar BOUHAFS Professeur au département de physique, pour avoir proposé et dirigé ce travail efficacement, En plus de son soutient pertinent et sa patience pendant toute la durée de ce travail.

Je remercie, Monsieur Mostépha LEMERINI, Professeur au département de physique à l'université ABOU BEKR BELKAID – TLEMCEN, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail en me faisant l'honneur de présider le jury de ma soutenance.

Je suis très honorée de la présence à mon jury de thèse de :

Monsieur Boumediene LASRI, Professeur à l'université de SAIDA, pour avoir accepté d'examiner mon travail, et participé à mon jury de thèse.

Monsieur Mourad MAHBOUB, professeur à l'université de Tlemcen, pour avoir bien voulu juger mon travail.

Monsieur Ghouti BASSOU, Professeur à l'université de Sidi Bel-Abbes, pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse.

Je remercie aussi tout le personnel du département de physique de la faculté des sciences de l'université ABOU BEKR BELKAID – TLEMCEN, pour leurs aides et patience en notre égard durant tout le travail, et en particulier monsieur BENOSMANE Abdelhakim l'adjoint du chef du département de physique des études de poste graduation pour nous avoir faciliter toutes les taches.

En terminant notre remerciement on n'oublie pas de remercier tous les collègues du labo de physique théorique.

Je remercie enfin ma petite famille, qui a réussi à me supporter durant ces années et m'a apporté une aide précieuse.

i

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

A toute ma famille sans exception du petit au grand et spécialement à mes parents qui m'ont entouré de leurs tendresses et de leurs soutient morales qui m'était d'un grand soutient pendant toute ma vie et particulièrement durant ce travail.

Sans oublier mon conjoint fidele KELTOUM qui m'était d'une grande aide et de sa patience sans limite.

A mes petites filles Kaoutar- Safa- Maroua- Ichrak-Bouchra

SOMMAIRE

Remerciements	i
Dédicaces	ii
Sommaire	iii
Résumé	vi
Liste des figures	vii
Liste des tableaux	xi
Introduction générale et motivation	1

Chapitre I : La Spectroscopie des plasmons dans les structures multicouches planes

I-1. Introduction	5
I-2. Types de plasmons	7
I-2.1. Plasmons de volume	7
I-2.2. Les plasmons de surface	8
I-2.2.1. Définition	8
I.2.2.2 types de plasmons de surface	10
I-2.2.3.Conditions d'existence des plasmons de surface	11
I-2.3. Relations de dispersion	15
I-2.3.1. Système à deux milieux semi- infinis	15
I-2.3.2. Système à trois milieux	17
I-2.4. Excitation des plasmons de surface	18
I-2.5. Couplage optique en mode de réflexion totale atténuée	20
I-2.6. Couplage optique par un réseau de diffraction	25
I-2.7. La résonance plasmon de surface (SPR) et ses applications	27
I-2.7.1. Détection de biomolécules et les mesures biochimiques	27
I-2.7.2. Détection en microscopie et interfaces de surfaces	28
I-2.7.3. Applications photonique	29
I-3. Synthèse bibliographique	30
I-4. Conclusion	31

Chapitre II : Propriétés optiques des matériaux nobles et dopés

II-1. Introduction	33
II-2. Propriétés des matériaux nobles	. 33
II-3. Propriétés optiques des matériaux nobles	. 33
II-3.1. Modèle de Drude	. 34
II-3.2. Méthode RPA	. 38
II-3.3. La résonance plasmon de surface pour les métaux nobles	. 38
II-4. Propriété optique des matériaux dopés	. 40
II-4.1. Types de semi conducteurs	. 40
II-4.1.1. Semi-conducteurs de type n	. 40
II-4.1.2. Semi-conducteurs de type p	. 41
II-4.2. Bandes d'énergie et les semi-conducteurs	. 41
II-4.3. Dopage des semi-conducteurs	. 42
II-5. Silicium : matériau d'étude	. 42
II-5.1. Etat naturel	. 42
II-5.2. Historique des applications du silicium	. 43
II-5.3. Production du silicium	. 43
II-5.3.1. Réduction de la silicium	. 43
II-5.3.2. Purification du silicium	. 43
II-5.4. Principales propriétés du silicium	. 44

II-5.4.1. Structure de bande	. 44
II-5.4.2. Propriétés optiques	. 45
II-6. Etude comparative entre le silicium et les métaux nobles	. 46
II-7. Conclusion	. 50

Chapitre III : Modélisation de la propagation de la lumière dans un bio senseur optique a semi-conducteur

III-1. Introduction	52
III-2. Détermination des paramètres de structure dans la configuration de Kretschmann	54
III-2.1. La résonance angulaire sur le profil de la réflectivité d'interface	54
III-3. Calcul Théorique de la réflectivité	55
III-3.1. Calcul de la Réflectivité Dans La Géométrie de Kretschmann	55
III-3.1.1. Interfaces matériaux- milieu ambiant	55
III-3.2. Champ électromagnétique d'interfaces d'une structure multicouche :	57
III-3.2.1. Calcul des réflectivités d'interfaces d'une structure multicouche	58
III-3.2.2. Calcul des réflectivités d'interfaces	59
III-4. Conclusion	61

Chapitre IV : Résultats et Discussions

IV-1. Introduction	. 63
IV-2. Structure matériau dopé / Milieu ambiant,	. 64
IV-2.1. Effet de la concentration sur la résonance angulaire	. 65
IV-2.1.1. L'interface matériau dopé p / Milieu ambiant Ed	. 65
IV-2.1.2. L'interface matériau dopé n / Milieu ambiant, Ed	. 66
IV-3. Structure multicouche	. 67
IV-3.1. Effet de la concentration des porteurs de charge	. 68
IV-3.1.1. La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n	. 68
IV-3.1.2. La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p	. 69
IV-3.2. Effet d'épaisseur de couche du matériau	. 70
IV-3.2.1. La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n	. 70
IV-3.2.2. La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p	. 71
IV-3.3. Effet de l'épaisseur de gap sur la résonance angulaire	. 72
IV-3.3.1. La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p	. 73
IV-3.3.2. La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n	. 73
IV-3.3.3. La structure multicouche matériau dopé p/gap/ matériau dopé n	. 74
IV-3.3.4. La structure multicouche matériau n/gap/matériau dopé p	. 74
IV-3.4. Etude angulaire de la résonance des PPS pour dg $\square \approx 1$. 75
IV-3.4.1. Etude angulaire de la résonance PPS pour dopage p	. 76
IV-3.4.2. Etude angulaire de la résonance PPS pour dopage n	. 77
IV-3.5. Etude angulaire de la RPP selon la nature du gap	. 79
IV-3.5.1. La structure Si(p) -gap-Si(p)	. 79
IV-3.5.2. La structure Si(n) -gap-Si(n)	. 79
IV-3.5.3. La structure Si(p) -gap-Si(n)	. 80
IV-3.5.4. La structure Si(n) -gap-Si(p)	. 80
IV-3.5.5. La structure Si(n) -gap-Si(n) pour dg ≈ 1	. 81
IV-3.5.6. La structure Si(p) -gap-Si(p)	. 81
IV-3.6. Etude Comparative de la résonance angulaire de PPS	. 82
IV-3.6.1. La comparaison de la Géométrie	. 82
IV-3.7. Facteur de confinement	. 84
IV-3.7.1. L'effet d'épaisseurs de gap	. 85
IV-3.7.2. L'effet de concentration	. 88
IV-4. Conclusion	. 92

Conclusion Générale	. 93
Références	. 95

Résumé

L'objectif principal de ce travail concerne l'exploration des performances d'un dispositif multicouche à base du silicium dopé qui peut être potentiellement utilisé pour développer des applications photoniques. La structuration du type Si/gap diélectrique/Si étant modélisée par les paramètres optiques et analysée en réflexion totale, à base d'une étude théorique des réponses aux interfaces (transmission/réflexion, la dispersion optique et le confinement électromagnétique) des modes plasmons-polaritons de surface, pour un dimensionnement sub-longueur d'onde, il est démontré la sensibilité du dispositif à guider et supporter des plasmons multi-modes. Cependant, sous l'influence de l'épaisseur du gap diélectrique, sa nature et la concentration des porteurs de charge, les caractéristiques de tels modes résonnants visualisées sur le couplage énergétique, et la largeur à mi-hauteur de résonance des plasmons justifient le potentiel compétitif d'une telle nanostructure de fonctionner comme une cavité interférométrique (Fabry-Pérot), un filtre optique et un détecteur fiable au diagnostic des interactions d'interface dans le spectre infrarouge. Cette dernière application vient du fait que les résultats reportés prédisent l'efficacité de la structure multicouche élaborée à déplacer la position angulaire des résonances et supporter une distribution de champ électromagnétique longitudinal dont l'intensité reste contrôlable sur la concentration des porteurs de charge ou la largeur du gap diélectrique.

Mots clefs : dispositif multicouche, Silicium dopé, Modes plasmons-polaritons de surface, Confinement électromagnétique

Abstract

The main purpose of this work concerns performances exploration of a multilayer devise based on the doped silicon that can potentially be used to develop photonic applications. The typical structuration Si/dielectric gap/Si as described by its optical parameters and analyzed in total reflection from a theoretical study leading to express interface responses (transmission/reflection, optical dispersion and electromagnetic confinement) of surface plasmon-polariton modes in the regime at the nanoscale sub-wavelength, it is demonstrated the device sensitivity to sustain multimode- plasmons . However, under the influence of the dielectric gap width and its optical nature and the carriers concentration, features of such resonant modes observed on the energetic coupling and the full width at the half maximum of Plasmon resonances justify the competitive potential of such nanostructure to operate in the infrared as an interferometric Fabry-Perot cavity, a selective filter and tunable sensor of interactions occurred in the vicinity of an interface. The later application comes from the fact that the reported results predict the ability of the elaborated structure to shift the angular position of resonances and enhancing electromagnetic field distribution where its intensity remains controllable on increasing both carrier concentration and the dielectric gap width.

Keywords: Multilayer device, Doped Silicon, Surface Plasmon-polariton Modes, Electromagnetic Confinement

ملخص

الهدف الرئيسي من هذا العمل هو تصميم جهاز استشعار متعدد الطبقات المعدنية من (السيليسيوم الشائب) ، والتي يمكن أن يسمح استخدامها لتطوير التطبيقات الضوئية . ننمذج التشكيلة (سيليسيوم شائب / فجوة عازلة / سيليسيوم شائب) باستعمال معطيات بصرية و تحليلها بخاصية الانعكاس الكلي . استنادا على الدراسة النظرية للانعكاس على السطح الفاصل (الناقل / العاكس التشتت الضوئي و السياق الكهرومغناطيسي) نبرز شكل موجة سطحية اين نضبط بعد طبقة السيليسيوم اقل من طول موجة الفحص ، فيظهر صلاحية الجهاز لتوجيه وحمل بلازمة متعددة الطباقات وهذه الخصوصيات تعين وفق تأثير سمك الفجوة العازلة وطبيعتها و تركيز حاملات الشحنة . عدة نتائج تحصلنا عليها، والخاصة بالتجاوب الرنيني التي تظهر على طيف الطاقة . تشتغل هذه البنية النانومترية بمثابة تجويف التداخل (Fabry-Pérot) ، وهو مرشح بصري لعدة ترددات و جهاز استشعار التفاعلات والتشخيص الوجهات في مجال طيف الأشعة ما تحت الحمراء.

هذا التطبيق للتنبؤ بفعالية البنية المتعددة الطبقات كان بسبب فعالية التأثير الفائق للموضع الزاوي للرنين الخاص لتوزيع حقل كهرومغناطيسي طولي مع عوامل الجملة و تركيز حاملات الشحنة .

كلمات مفتاحيه: جهاز استشعار ظواهر بصرية ، السيليسيوم الشائب ، وسائط الموجة السطحية ، السياق الكهرومغناطيسي

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1: une représentation schématique des oscillations de charges

Figure 1-2: Géométrie de l'interface métal diélectrique que nous considérons. La composante transverse Ψ du champ est représentée.

Figure 1-3: géométrie d'un composant à deux milieux semi-infinis et une couche mince entre deux milieux.

Figure1-4 : Relations de dispersion de SPs pour une interface métal/air [31]

Figure.1-5 : Système à trois milieux constitué par une couche mince et deux milieux semiinfinis

Figure.1-6 : Courbes de dispersion de SPs et d'une onde lumineuse progressive dans un milieu diélectrique.[31]

Figure 1-7: Couplage optique par un prisme.

Figure 1-8 : Structure du multicouche plasmonique :

Figure 1-9 : Principe de couplage optique.

Figure 1-10 : Coefficients de réflexion d'une interface « Argent/Air » en fonction de l'angle d'incidence pour les polarisations TM (p) et TE (s). Données de calculs : une couche d'argent de ε_m =-18 + i0,5, d'épaisseur 45nm, l'indice du prisme n_p=1.515[31]

Figure 1-11: Ordres de diffraction d'un réseau.

Figure 1-12 : Principe du couplage optique par un réseau de diffraction.[31]

Figure 1-13: *M*icroscope à balayage à effet tunnel optique (PSTM)

Figure 1-14: Modification de la distribution du champ d'un mode guide d'onde simple à un mode guide d'onde associée à un PS [28].

Figure 2-1 : Parties réelle et imaginaire de l'indice complexe (n et k)et de la constante diélectrique (ε_1 et ε_2) mesurées dans l'argent[41].

Figure 2-2 : Bandes d'energie d'un semi-conducteur extrinsèque de type <n>.

Figure 2-3 : Bande d'énergie d'un semi-conducteur extrinsèque de type .

Figure 2-4: Structure des bandes dans A- les isolants et B- les semi-conducteurs.

Figure 2-5 : Structure de bande du silicium monocristallin.

Figure 2-6 :Coefficient d'absorption du silicium cristallin en fonction de l'énergie des photons[71].

Figure 2-7: Indice de réfraction réel (n) du silicium cristallin en fonction de l'énergie des photons incidents [71]

Figure. 2-8: Comportement de partie imaginaire de la permittivité du Ag en fonction de la longueur d'onde

Figure. 2-9 : Comportement de partie réel de la permittivité du Ag en fonction de la longueur d'onde

Figure 2-10 : Comportement de partie imaginaire de la permittivité du silicium (dopé p) en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentration N des porteurs de charge

Figure 2-11: Comportement de partie réelle de la permittivité du silicium (dopé p) en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentration N des porteurs de charge

Figure 3-1: orientations des vecteurs \vec{E} , \vec{B} , $et \vec{K}$ par rapport à la direction de propagation.

Figure 3.2 : Schéma d'une seule couche de configuration Kretschmann[74]

Figure 3.3 : Schéma d'une multicouche de configuration Kretschmann-Raether (structure a trois interface)[74]

Figure 4.1 : Réflectivité angulaire mesurée dans la configuration de Kretschmann sur le Si dopé p en contact du milieu ambiant (air, $\epsilon_d = 1$). La sensibilité de la configuration est dégagée sur l'effet de la concentration en porteurs de charge, N du Si (paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m$, $\lambda = 8.03 \ \mu m$ $\epsilon_p = 2.1$, $n_g = 1,0$)

Figure 4.2 : Réflectivité angulaire mesurée dans la configuration de Kretschmann sur le Si dopé n en contact du milieu ambiant (air, $\epsilon_d = 1$). La sensibilité de la configuration est dégagée sur l'effet de la concentration en porteurs de charge, N du Si. (Paramètres de simulation : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.030 \ \mu m$, $\epsilon_p=2.1$, $n_g=1,0$)

Figure 4.3: Sensibilité de la structure multicouche observée sur la réponse SPR sous l'effet de la variation de la concentration en porteurs de charge pour une épaisseur fixée de la couche plasmonique active et un gap étalonné dans l'ordre de la longueur d'onde d'excitation. Pour Silicium dope n (paramètres de la simulation: N= $2x10^{20}$, $3x10^{20}$, $4x10^{20}$, $5x10^{20}$ cm⁻³ d_g = 8.05 µm, d_m=0.2 µm₈ = **2.1**, n_g = **1.0**)

Figure 4-4 : Sensibilité de la structure multicouche observée sur la réponse SPR sous l'effet de la variation de la concentration en porteurs de charge pour une épaisseur fixée de la couche plasmonique active et un gap étalonné dans l'ordre de la longueur d'onde d'excitation.

Figure 4- 4: Effet de la concentration en porteurs de charge sur la SPR du mode principal et sur l'intensité du creux

Figure 4-5 :Sensibilité de la structure multicouche observée sur la réponse SPR sous l'effet de la variation de l'épaisseur de la couche plasmonique active pour une concentration fixe de $N=2x10^{20}$ cm⁻³ et d_g =8.05 µm, λ =8.03 µm s_{g} = 2.1 n_{g} = 1.0)

Figure 4-6 : Sensibilité de la structure multicouche observée sur la réponse SPR sous l'effet de la variation de l'épaisseur de la couche plasmonique active M_1 (Si) dopée p, pour une concentration fixe de N =2x10²⁰ cm⁻³ et dg =8.05 µm, λ =8.03 µm, ϵ_{p} = 2.1, n_{g} = 1,0

Figure 4-7 :la comportement de couche minces silicium dopé p pour différents largeurs d_g du gap les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m$, $\lambda = 8.03 \ \mu m \epsilon_p = 2.1$, $n_g = 1,0$ et $\epsilon_m = -17.14 + i \ 10.65$

Figure 4-8 :la comportement de couche minecs (silicium dopé n) pour différents largeus d_g du gap les paramètres de simulation sont:($d_m = 0.2 \ \mu m$, $\lambda = 8.030 \ \mu m \ \varepsilon_p = 2.1 \ n_g = (1,0)$ et $\varepsilon_m = -24.08 + i15.86$)

Figure 4-9 :la comportement de couche mines (silicium dopé n et p) pour différents largeurs d_g du gap les paramètres de simulation sont : d_m=0.2 µm , λ =8.03 µm, n_g =(1,0) , $\epsilon_{m1}(p) = -17.14 + i10.63$, $\epsilon_{m2}(n) = -24.08 + i15.86$

Figure 4-10 : la comportement de couche mines (silicium dopé n et p) pour différents largues d_g du gap les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$, $n_g=(1,0)$, $\epsilon_{m1}(n) = -24.08 + i15.86$, $\epsilon_{m2}(p) = -17.14 + i10.65$

Figure 4-11 :la comportement de couche mines (interfaces de silicium p/ diélectriques de Gap) pour différents largeur du gap d_g=6500, 7000, 7500, 8020 et 8050nm. (les paramètres de simulation sont : d_m=0.2 µm , λ =8.03 µm n_g=(1,0), ϵ_m = -42.36 + i27.42, ϵ_p =2.1)

Figure 4-12 :la comportement de couche mines (interfaces de silicium p/ diélectriques de gap) pour différents largeur du gap $d_{g=6500}$, 7000, 7500, 8020 et 8050nm. (les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$, $n_g=(1,0)$, $\epsilon_m=-59.48 + i \ 37.4$, $\epsilon_p=2.1$)

Figure 4-13 :la comportement de couche mines (interfaces de silicium n/ diélectriques de Gap) pour différents largeur du gap dg=6.5µm, 7 µm, 7.5 µm, 8.02 µm et 8.05 µm. (les paramètres de simulation sont : dm=0.2 µm, λ =8.03µm, ng =(1,0), $\epsilon_m(p) = -49 + i38.82$, $\epsilon_p = 2.1$)

Figure 4-14 :la comportement de couche mines (interfaces de silicium n/ diélectriques de Gap) pour différents largeur du gap $d_g = 6.5$, 7, 7.5, 8.02 et 8.05µm les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$, $n_g=(1,0), \epsilon_m(n) = -56.49 + i 51.42$, $\epsilon_p = 2.1$

Figure 4-15 :la comportement de couche mines (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. les paramètres de simulation sont : $d_m=200 \text{ nm}$, $\lambda=8.03 \mu m \epsilon_p=2.1$, et $\epsilon_m = -17.14 + i \ 10.63$

Figure 4-16 :la comportement de couche mines (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5$, et 3. les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m \ d_g = 0.45 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m \ \epsilon_p=2.1$, et $\epsilon_m = -24.08 + i \ 15.86$

Figure 4-17 :la comportement de couche mines (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5, \text{ et } 3$. les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m$ $d_g = 0.45 \ \mu m$ $\lambda = 8.03 \ \mu m$ $\epsilon_p = 2.1$, et $\epsilon_{m1}(p) = -17.14 + i \ 10.63$, $\epsilon_{m2}(n) = -24.08 + i \ 15.86$

Figure 4-18 :Simulations numérique de la comportement de couche mines (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. les paramètres de simulation sont $d_m=0.2 \ \mu m \ d_g = 0.450 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m \ \epsilon_p=2.1 \ \epsilon_{m1}(n) = -24.08 + i \ 15.86 \ \epsilon_{m2}(p) = -17.14 + i \ 10.63$,

Figure 4-19 : la comportement de couche mines (silicium dopé n) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m$ $d_g = 7 \ \mu m$, $\lambda = 8.03 \ \mu m$ $\epsilon_p = 2.1$, et, $\epsilon_{m1}(n) = -49 + i \ 38.82$

Figure 4-20 : Simulations numérique de la comportement de couche minces (silicium dopé n) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. les paramètres de simulation sont $d_m=0.2 \ \mu m \ d_g = 7 \ \mu m \ \lambda = 8.03 \ \mu m \ \epsilon_p = 2.1 \$, et, $\epsilon_m \ (p) = -42.36 + i \ 27.42$,

Figure 4-21 :Etude comparative des réponses plasmoniques SPR simulées dans la géométrie Kretschmann Si/air et la structure MIM Si/air/Si la longueur d'onde d'excitation 8,03 µm.

Figure 4-22 :Simulations numérique de la comportement de couche mines (silicium dopé n) pour l'indice de gap réel $n_g = (1.5, 0)$ et deux concentration de porteurs de charges. les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m \ d_g = 7 \ \mu m \ \lambda = 8.03 \ \mu m \ \epsilon_p = 2.1 \epsilon_{m1}(n) = -49 + i 38.82$ et $\epsilon_{m1}(n) = -56.49 + i51.42$

Figure 4-23 : la comparaison de couche mines (silicium dopé p) pour l'indice de gap réel ng = (1.5, 0) et deux concentration de porteurs de charges. les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m \ d_g = 7 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m \ \epsilon_p=2.1$, $\epsilon_{m1}(n) = -42.36 + i \ 27.42$ et $\epsilon_{m1}(n)=-59.48 + i \ 37.45$

Figure 4-24 : Contrôle de l'intensité du confinement longitudinal sur la largeur du gap diélectrique d'onde. en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si de type n dopé avec de différente dg , dg << λ

Figure 4-25 : Contrôle de l'intensité du confinement longitudinal sur la largeur du gap diélectrique en régime sub-longueur d'onde. en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si de type p dopé avec de différente dg $<< \lambda$

Figure 4-26 : Contrôle de l'intensité du confinement longitudinal sur la largeur du gap diélectrique en régime sublongueur d'onde. en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé p avec de différente dg

Figure 4-28 : Contrôle de l'intensité du confinement longitudinal sur la largeur du gap diélectrique en régime sublongueur d'onde. en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé n avec de différente dg

Figure 4-29 : Evolution du confinement longitudinal avec l'angle d'incidence pour différentes largeurs du gap diélectrique en régime longueur d'onde pour un capteur de Si dopée n avec différents espaces d'air , comme dg > λ , avec N = 2 × 10²⁰ cm⁻³ .

Figure 4-30 : Evolution du confinement longitudinal avec l'angle d'incidence pour différentes largeurs du gap diélectrique en régime longueur d'onde ; pour un capteur de Si dopée p avec différents espaces d'air , comme dg > λ , avec N = 2 × 10²⁰ cm⁻³ .

Figure 4-31 : Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge pour un capteur de Si dopé n avec différentes concentrations de porteurs , 2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

Figure 4-32: Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge pour un capteur de Si dopé p avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

Figure 4-33: Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge d'incidence pour un capteur de Si dopé p avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

Figure 4-34 : Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge pour un capteur de Si dopé n avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

Figure 4-35: Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge pour un capteur de Si dopé n avec différentes concentrations de porteurs ,2, 3, 4, et 5×10^{20} cm⁻³.

Figure 4-36 : Evolution du facteur de confinement longitudinal des modes de structure en fonction de la concentration en porteurs de charge pour un capteur de Si dopé p avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2-1 : Paramètres caractéristiques de la structure de bandes (fréquence plasma, seuil des transitions inter bandes et constante diélectrique inter bande à fréquence nulle) pour trois métaux nobles .[52]

Tableau 3-1 :Dépendance de la résistivité. en fonction de la concentration des porteurs de charge du silicium d'après la référence [Handbook]

 Tableau 4-1 :valeurs des caractéristiques physiques du silicium dopé

Tableau 4-2 :valeurs de l'angle de résonance θ_{SPR} et de la réflectivité d'interface Si(p)diélectrique obtenu par simulation numérique

Tableau 4-3 : valeurs de l'angle de résonance θ_{SPR} et de la réflectivité d'interface Si(n)diélectrique obtenu par simulation numérique

Tableau 4-4 :valeurs de la réflectivité de la structure Si(n)-diélectrique-Si(n)

Tableau 4-5 :valeurs de la réflectivité de la structure Si(p)-diélectrique-Si(p)

Tableau 4-6 :valeurs de l'epaisseur de gap et Permittivité de Si

Tableau 4-7 :les paramètres de simulation

Introduction générale

Introduction générale et motivation

Le sujet entrepris dans ce travail évoque la plasmonique, une discipline scientifique et technologique relativement nouvelle qui fait le gap entre la photonique, la chimie et la science des matériaux.

La plasmonique exploite les propriétés optiques des nanostructures métalliques réalisables par différents procédés (lithographie par faisceau d'électrons comme exemple) et offre la possibilité de manipuler le confinement électromagnétique de la lumière au-delà de la diffraction limite. Autrement dit, les paramètres géométriques de structures sont étalonnés dans un ordre d'échelle inférieur à la longueur d'onde. Ainsi, la plasmonique a permis de grandes avancées dans le domaine de diagnostic des effets de surface engendrés au voisinage d'une interface métaldiélectrique et la caractérisation des couches minces dont le principe de base repose sur la confrontation des données expérimentales avec celles prédites par un calcul numérique.

Les configurations géométriques appropriées pour le développement de telles applications sont variantes en termes de conditions d'excitation par une radiation (de polarisation transverse magnétique), de dispositifs de couplage (prisme optique, guide d'onde et réseau métallique), et de l'architecture et l'étalonnage en échelle micro/ nanométrique des structures adoptées.

La première observation du phénomène; changement brusque en intensité de la résonance plasmon de surface **(SPR)** : surface plasmon resonance en anglais) fut décrite en 1902 par Wood sur le spectre du mercure. C'est plus tard, Fano, en 1941, apporte un fondement théorique à ces expériences pour faire preuve que le phénomène est due à la l'existence des ondes (quasi-stationnaires) de surface sur un réseau de diffraction.

En 1958, R. Ferrell décrit théoriquement le phénomène de couplage entre une onde électromagnétique et les modes de surface entre une couche métallique et un milieu diélectrique.

En ayant adopté un milieu ambiant; une couche d'air disposée entre un prisme optique et une couche métallique, en 1968, Otto exprime que la décroissance de la réflectivité en réflexion totale atténuée (ATR) est la conséquence de la génération d'une onde de surface (dite plasmon de surface) dont la position angulaire, notée θ_{SPR} est localisée au-delà de l'angle critique définie selon la loi de Fresnel. Cette même configuration étant différemment disposée, en 1978, Kretschmann et Raether suggèrent une idée similaire en considérant le métal directement placé sur le prisme pour être en contact avec un milieu diélectrique. Il est à préciser que l'intérêt du prisme de fort indice de réfraction, $n_p = \sqrt{\varepsilon_p}$ par rapport à l'indice du milieu diélectrique (en contact avec le métal), $n_d = \sqrt{\varepsilon_d}$; i.e. $\varepsilon_p > \varepsilon_d$, est pour augmenter le vecteur d'onde de l'onde incidente, i.e., réalisé l'accord de couplage.

Dans la suite de ce manuscrit, une description de cet intérêt sera explicitée analytiquement sur la relation de dispersion des modes résonnants de structure.

Cette dernière configuration a vu un grand nombre d'applications potentielles pour citer deux exemples; le suivi en temps réel de l'identification des interactions biochimiques produites au voisinage d'une surface métallique et la SPR en tant que biocapteur pour détecter de faibles concentrations de gaz anesthésique.

De telles applications typiques offertes parmi d'autres par l'emploi de la technique SPR reviennent du fait que les paramètres de structures (augmentation d'épaisseur et la variation d'indice de réfraction) engendrent des sensibilités notables donnant lieu une variation de la largeur à mi-hauteur (FWHM), le taux d'énergie EM transférée aux plasmons, et l'effet de décalage de la SPR du profil angulaire/spectral d'interface. Dans l'intérêt de démontrer d'autres limites offertes en termes d'amplification du confinement des modes SPR, la multiplication des paramètres d'influence et leurs effets sur les caractéristiques induites sur le profil SPR, nous suggérons l'élaboration d'une structure en cavité pour décrire ses propriétés relatives à la réponse SPR. Pour dégager une comparaison, les performances de la structure élaborée pour les comparer à celles de la configuration conventionnelle (monocouche).

D'une manière générale, le phénomène de la résonance plasmon de surface mis en évidence dans la condition de la réflexion totale atténuée utilisant un prisme ou un réseau métallique, due à la présence d'une mince couche de métal est potentiellement reconnue pour la réalisation de détecteurs et de senseurs pour différents types de composants (solides, liquides ou gazeux). Cette diversité d'applications justifie pleinement les nombreux travaux visant à améliorer leurs performances et à miniaturiser leurs dimensions et c'est dans cet aspect que nous allons traiter la problématique.

Suite à cette introduction générale, la thèse rapporte quatre chapitres. Le premier décrit la spectroscopie des plasmons dans les structures multicouches planes.

3

Dans le second chapitre. il est décrit les propriétés optiques des matériaux nobles (Ag) et le silicium (Si) dopé. Une attention particulière a été portée sur l'excitation du silicium dopé dans une gamme de longueur d'onde 1-20 μ m et une gamme des concentrations en porteurs de charge (2-8)x10²⁰ cm⁻³.

Le troisième chapitre rapporte la modélisation de la propagation de la lumière dans le biosenseur optique élaboré sur laquelle repose l'analyse des résultats..

Les résultats obtenus sont discutés dans le dernier chapitre et nous terminerons cette thèse par une conclusion et perspectives.

Chapitre I

La Spectroscopie des plasmons dans les structures multicouches planes

1.1.Introduction

La première observation originale des plasmons de surface remonte depuis 1902, lorsque Wood [3.] irradia en lumière polychromatique un réseau de diffraction métallique. En conséquence, il remarqua des anomalies sous forme des fines bandes sombres dans le spectre de réflectivité spéculaire du réseau. Selon les travaux théoriques développés par Fano [1], la conclusion sur ces anomalies est qu'elles sont significatives à la présence des ondes de surface que supporte le réseau de diffraction.

Ces dernières années, l'étude de l'interaction de la lumière avec les nanostructures métalliques, à laquelle est attribué le nom ''plasmonique'', a connu un développement intensif dans la recherche en raison de la particularité des plasmons de surface. Ces ondes de caractère evanescent sont produites par un couplage entre les photons incidents et les électrons libres de conduction et se propagent non pas dans le volume d'un matériau diélectrique, mais le long d'une interface. Depuis leur mise en évidence, les plasmons de surface ont permis de proposer des solutions nouvelles pour des dispositifs de détection, de guidage ou d'émission de lumière [11]. Ils sont très sensibles à l'environnement proche des métaux. Autrement dit, toute variation An de l'indice optique près de l'interface change leur condition de résonance sur un film métallique. En mesurant ce décalage observé sur la réponse optique de l'interface, il est possible de détecter la présence de seulement quelques molécules au voisinage d'un film métallique, et de réaliser ainsi des détecteurs très sensibles par exemple pour l'analyse de molécules isolées en biologie [12] ou en chimie [13]. Ainsi, il est nécessaire de contrôler les propriétés des plasmons de surface en structurant de façon appropriée les interfaces métalliques. L'objectif est évidemment de modifier les propriétés de propagation des plasmons, dit encore plasmon-polaritons de surface (PPS), sous l'effet des paramètres géométriques et optiques d'une structure considérée. Un plasmon de surface est une onde électromagnétique résultant d'une oscillation collective des électrons libres situés à l'interface métal-diélectrique d'indices opposés. Due à la présence du métal, l'excitation des plasmons est traduite par une chute de la réflectivité mesurable soit en mode de détection angulaire ou spectral. Ce phénomène de transfert d'énergie du faisceau incident au profit des électrons libres proches de l'interface métal/diélectrique est produit lorsque les conditions de couplage sont remplies. Ces modes résonnants ont la propriété de concentrer l'énergie électromagnétique dans des régions de l'interface dont la taille est de l'ordre de la longueur d'onde de l'irradiation incidente. Ceci ouvre des possibilités de développer diverses applications en nano-photonique.

La résonance des plasmons dépend de nombreux paramètres tels que la nature des matériaux : les métaux nobles (Or, Argent, Nickel...) couramment utilisés en pratique pour leur comportement optique intéressant (faible fréquence de plasma) et la possibilité d'une excitation plasmonique dans le visible. L'excitation des plasmons par la lumière cohérente conduit à une forte absorption et une exaltation du champ local électromagnétique. Les modes plasmons ont commencé à susciter de l'intérêt dès le début du 20^{em} siècle (Zenneck, 1907; Mie, 1908; Sommerfeld,1909). Toute fois, c'est Ritchie [14.] qui a prédit ces ondes de surface. Puis en 1968, Otto montre que la réflexion totale atténuée peut provoquer une excitation de ces ondes de surface. Par la suite, Kretschmann et Raether arrivent aux mêmes résultats à partir d'une configuration modifiée de la méthode de la Réflexion Totale Atténuée [14]. Ces études ont permis de faire avancer les travaux dans le domaine des plasmons de surface notamment dans le cadre de la caractérisation des propriétés optiques des films minces et à l'étude des processus se déroulant sur des surfaces métalliques. Les progrès récents réalisés dans les différents champs d'application comme la structuration, la manipulation et l'observation des modes plasmoniques à l'échelle nanométrique contribuent à revitaliser ce domaine [12].

Dans ce chapitre, nous allons présenter une description des plasmons de surface (PS) et des applications récemment développées dans le domaine de la spectroscopie en champ lointain et proche [13].

1.2. Les types des plasmons

Les plasmons sont de deux types selon le mode d'excitation : plasmons de surface (localisés/délocalisés) et les plasmons de volume.

1.2.1 Plasmons de volume

Des oscillations du plasma peuvent se propager dans le volume du métal. Le quantum d'excitation de ces oscillations longitudinales de la densité de charge est appelé un plasmon de volume. L'énergie de ce plasmon peut etre caractérisé par l'équation suivante :

$$\hbar\omega_p = \hbar\sqrt{4\pi n e^2/m_0}$$
 1-1

e et m_0 sont respectivement la charge et la masse de l'électron libre, et n est la densité d'électrons qui est une valeur caractéristique du métal. Cette valeur de l'énergie plasmon est donc différente suivant le métal considéré, par exemple,

pour l'argent

 $-\hbar\omega_p = 8980 \text{ meV}$

pour l'or

 $-\hbar\omega_p = 9030 \text{ meV}.$

Il est à noter que les excitations de volume ne font pas l'objet de la présente étude. Notre étude est restreinte uniquement aux plasmons de surface délocalisés.

1.2.2 Les plasmons de surface délocalisés:

1.2.2.1 Définition

Les métaux nobles et les semi - conducteurs peuvent être décrits assez convenablement par le modèle des électrons libres quant à leur structure électronique. Cette approche consiste à traiter les électrons de valence du métal comme un gaz d'électrons libres [11], ignorant le réseau métallique en première approximation. Un gaz dense de particules chargées est appelé un plasma et on parle d'un plasma d'électrons libres à l'intérieur d'un métal.

Une extension importante de la physique des plasmons est le concept de plasmon de surface [14]. La théorie de Maxwell montre que des ondes électromagnétiques peuvent se propager à l'interface entre un métal de fonction diélectrique complexe et un diélectrique de permittivité réelle. Ces ondes sont associées à des oscillations du plasma d'électrons libres à la surface du métal, on les appelle les plasmons de surface [14]. Ce sont à la fois une excitation collective des électrons et une onde électromagnétique existant à la surface du métal. On parle parfois de polaritons plasmons de surface pour faire référence à cette nature hybride. Le maximum d'intensité du champ associé à cette onde se trouve à l'interface métal-diélectrique et décroit ailleurs. Autrement dit, le champ électromagnétique évolue de part et d'autre des deux milieux dans une décroissance exponentielle suivant la direction perpendiculaire à l'interface, ce qui fait le caractère évanescent des ondes de surface. La figure (1.1) est une représentation schématique des oscillations de charges et présentant la dépendance exponentielle du champ électrique associé au plasmon de surface.



Figure.1.1. Illustration de la nature décroissance de l'onde incidente de part et d'autre d'une interface plasmonique active.

La particularité d'évanescence liée aux SPPs est que le champ EM décroit exponentiellement dans la direction perpendiculaire des deux milieux de l'interface, ce qui est une caractéristique spécifique des ondes SPPs telle que le champ prend une intensité maximale sur l'interface. Et comme illustrer par la figure. 1.1(a), une onde électromagnétique piégée au voisinage d'une surface métallique interagit seulement à une certaine profondeur de pénétration due au phénomène de dissipation d'énergie mesurable intrinsèquement selon les fonctions optiques du métal.

Ainsi, un champ électrique évanescent de toute surface d'un métal est décrit comme :

$$E(r,t) = E_0(r,t)e^{in\omega t}e^{-z/\delta}$$
 1-2

où n est l'indice de réfraction du métal, z la direction spatiale de propagation du champ électrique et.

 $\delta = \frac{c}{\omega k} = \frac{\lambda}{2\pi k}$ (k est l'absorbance), la profondeur de peau déterminant l'atténuation du champ électrique dans la direction perpendiculaire à l'interface.



Figure. 1.2: (a) représentation schématique de la propagation des oscillations du plasma d'électrons libres à la surface du métal. La figure (b) représentation schématique de la composante normale du champ électrique du plasmon de surface selon la direction *z* perpendiculaire à l'interface [31].

Ces modes de surface ont été décrites historiquement tout d'abord par la spectroscopie de perte d'énergie d'électrons puis par interaction avec la lumière électromagnétique. Dans ce dernier cas, des géométries particulières sont adaptées pour la mise en évidence de ce phénomène d'interface entre un matériau conducteur et un diélectrique.

1.2.2.2 types de plasmons de surface

Les plasmons de surface peuvent être distingués en différents types : plasmons de surface localisés, et plasmons de surface délocalisés.

- ✓ Les plasmons de surface délocalisés sont des plasmons qui se propageant sur des surfaces métalliques planes.
- ✓ Les plasmons de surface localisés correspondent à des excitations localisées du plasma d'électrons à l'intérieur de petites structures métalliques dont la taille est de quelques dizaines de nanomètre. C'est par exemple des nanoparticules ou des rugosités de surface de certaines structures métalliques.

Dans les champs d'investigation de l'optique, l'un des aspects particulièrement attractifs des plasmons de surface est la façon dont ils peuvent se générer et se guider dans des structures de tailles plus petites que la longueur d'onde de l'onde d'excitation. Cela permet d'une part de faire fortement interagir les plasmons de surface avec leur environnement comme dans le cas de matériaux à l'interface avec le métal. D'autre part, cela rend possible la réalisation de

structures guidantes ou de composants complexes sub-longueur d'onde susceptibles de supporter des plasmons de surface.

1.2.2.3 Conditions d'existence des plasmons de surface :

Pour déterminer les composantes du champ électromagnétique associé au plasmon de surface, nous modélisons le métal comme un milieu diélectrique de constante diélectrique ε_m . Dans le modèle simplifié de Drude, i.e.., dans une première approximation, la permittivité diélectrique d'un conducteur métallique est donnée par :

$$\varepsilon_m = 1 - \omega_p^2 / \omega^2 \tag{1-3}$$

où $\omega_p = \left(\frac{4\pi n e^2}{m}\right)^{1/2}$ est la pulsation plasma de volume (une valeur caractéristique du métal), ω est la fréquence angulaire. Pour les métaux nobles, la partie réelle de la permittivité ε_m est négative pour une pulsation inférieure à ω_p . Dans le domaine de l'ultraviolet, et d'après l'évaluation numérique de ω_p , les métaux alcalins se comportent en effet comme des milieux transparents. Pour une telle particularité, la fréquence seuil et ou la longueur d'onde associée correspondent respectivement à :

$$f_{p} = 11.4x(r_{s}/a_{0})^{-3/2}x10^{15}\text{Hz}$$
$$\lambda_{p} = \frac{c}{f_{p}} = 0.026x\left(\frac{r_{s}}{a_{0}}\right)^{3/2}\mu\text{m}$$

Cependant, ce modèle exprimé par l'Eq. 1-3, ne rend pas compte de toute la complexité du métal, par la suite, nous avons utilisé pour nos calculs une constante diélectrique complexe de la forme

$$\varepsilon_m = \varepsilon_m' + i\varepsilon_m'' \qquad 1-4$$

 ε'_m est négatif pour une longueur considérée. Pour le matériau actif impliqué dans notre étude, nous avons utilisé des valeurs déduites des mesures expérimentales provenant de la bibliographie selon un modèle d'indice dépendant du dopage.

Considérons les plasmons de surface comme une onde électromagnétique se propageant à l'interface plane entre un milieu diélectrique et un métal dans une configuration ATR (Atenuated total reflexion). La pulsation ω_p de cette onde est liée au vecteur d'onde k par une relation de dispersion caractéristique. Nous allons spécifier dans cette partie les conditions d'existence des plasmons de surface en exprimant les champs électromagnétiques de propagation et l'emploi des équations de Maxwell ainsi que les conditions limites entre les différents milieux de la géométrie adoptée.

Nous considérons deux milieux semi-infinis, l'un constitué d'un milieu diélectrique et l'autre d'un métal. Dans un premier temps nous considérerons un métal parfait non absorbant, $\varepsilon_m^{''} = 0$. La figure (1-2) présente le schéma du système, le plan *xoy* est défini comme celui de l'interface et la direction *z* est perpendiculaire à celle-ci. Le plasmon se propage selon la direction *x*, cela signifie que le système est invariant selon *y*. Dans ces conditions, si l'on considère une onde polarisée linéairement TE ou TM, nous définissons Ψ_j comme étant la composante transverse du champ :



Figure. 1.2: Géométrie de l'interface métal diélectrique que nous considérons. La composante transverse Ψ du champ est représentée.

 $\Psi_j = E_{jy}$ pour le cas d'une polarisation transverse électrique (TE)

 $\Psi_i = H_{iy}$ pour le cas d'une polarisation transverse magnétique (TM)

où l'indice j=d, *m* désigne le milieu diélectrique ou métallique (Cf. Fig. 1.2). Nous considérerons dans le calcul qui suit la dépendance des champs électromagnétiques avec le temps *t* en $e^{i\omega t}$, et où les relations de Maxwell permettent de déduire l'équation de propagation comme suite :

$$\Delta \Psi_i + \varepsilon_i \left(\omega^2 / c^2 \right) \Psi_i = 0$$
 1-6

où ε_j correspond à la constante diélectrique du milieu *j* impliqué (d ou m). En rappelant que l'onde de surface est associée à un champ Ψ_j de nature évanescente de part et d'autre de l'interface dans la direction perpendiculaire *z*, en conséquence la solution qui traduise cette propriété inpose l'écriture sous la forme :

-pour le métal situé à la position z < 0,

$$\Psi_m = A_m exp(\alpha_m z)e^{i(k_x x - \omega t)}$$
 1-7

-pour le diélectrique situé à la position z

$$\Psi_d = A_d exp(-\alpha_d z)e^{i(k_x x - \omega t)}$$
 1-8

Ici, les termes α_j sont supposés des constantes positives, pour prendre en compte l'évanescence, et k_x n'est pas un imaginaire pur pour traduire la propagation de l'onde plasmon de surface selon la direction x. Ainsi, il revient à déduire depuis les conditions limites au voisinage de l'interface :

i) dans le cas de d'une onde incidente polarisée TE, selon les Eqs.1.7 et 1.8 à la limite z=0 :

$$\frac{\partial E_d}{\partial z} (z=0) = \frac{\partial E_m}{\partial z} (z=0)$$

ii)

$$\frac{\partial E_d}{\partial z} = \frac{\partial E_m}{\partial z}$$
 et $E_d = E_d$ 1-9

En remplaçant E_j dans ces relations par les valeurs des relations (1-8), nous obtenons :

$$-\alpha_d A_d = \alpha_m A_m \qquad \text{et} \quad A_d = A_m \qquad \qquad 1-10$$

Ainsi, on obtient $\alpha_m = -\alpha_d$. Seulement cette solution est impossible puisque les α_j sont positifs et ceci démontre en conséquence que les plasmons de surface ne peuvent être existés en polarisation TE.

Dans un autre cas où l'onde est polarisée transverse magnétique (TM), les conditions à l'interface s'expriment à la limite z = 0:

$$\frac{1}{\varepsilon_d} \frac{\partial H_d}{\partial z} = \frac{1}{\varepsilon_m} \frac{\partial H_m}{\partial z} \qquad \text{et} \qquad H_d = H_m \qquad 1-11$$

D'où nous obtenons les relations entre les αj et A_j :

$$\frac{\alpha_d A_d}{\varepsilon_d} = \frac{\alpha_m A_m}{\varepsilon_m} \quad \text{et} \quad \alpha_d = \alpha_m \tag{1-12}$$

Sachant que α_m et α_d sont positifs, ce cas impose que ε_d , $\varepsilon_m < 0$. Ces ondes électromagnétiques de surface, les plasmons, ne peuvent se propager au voisinage de l'interface entre les deux milieux que pour des constantes diélectriques de signes opposés. Cette condition est vérifiée entre un diélectrique ($\varepsilon_d > 0$) et un métal ($Re(\varepsilon_m) < 0$). Finalement, les plasmons

de surface n'existent que dans le cas d'une d'excitation de polarisation TM. Dans la suite de nos calculs développés nous ne prendrons en compte que le cas de la solution $\Psi_j = H_j$. En remplaçant les expressions H_j obtenues selon l'Eq. (1-5) dans l'équation de propagation (1.6), nous obtenons :

$$-\alpha_j^2 + k_x^2 = \varepsilon_j \frac{\omega^2}{c^2}$$
 1-13

En introduisant dans cette dernière équation (1. 13) le résultat de la relation de continuité exprimée par l'Eq.1.9, il vient alors la relation de dispersion décrivant le mode de propagation des ondes dans la direction longitudinale :

$$k_x = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_d \varepsilon_m}{\varepsilon_d + \varepsilon_m}\right)^{1/2}$$
 1-14

 k_x le vecteur d'onde propagatif du plasmon dans la direction x, sur la surface métallique. Le vecteur d'onde k_x du plasmon de surface est alors un nombre complexe, $k_x = k'_x + ik''_x$ (où les k'_x et k''_x sont des nombres réels). En considérant $\varepsilon'_m >> \varepsilon''_m$ nous obtenons alors :

$$\mathbf{k}'_{\mathbf{x}} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon'_{\mathbf{m}} \varepsilon_{\mathbf{d}}}{\varepsilon'_{\mathbf{m}} + \varepsilon_{\mathbf{d}}} \right)^{1/2}$$
 1-15

$$k_x'' = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_m' \varepsilon_d}{\varepsilon_m' + \varepsilon_d}\right)^{3/2} \frac{\varepsilon_m''}{2\varepsilon_m''}$$
 1-16

Pour que k'_x soit réel, il faut que

$$\frac{\varepsilon_{m}}{\varepsilon_{m}}\varepsilon_{d}}{\varepsilon_{m}} > 0$$
 1-17

c'est-à-dire $\epsilon_{d}<-\epsilon_{m}^{'}$ avec $~\epsilon_{m}^{'}<0$

Cette condition est plus restrictive que l'inéquation ε_d , $\varepsilon_m < 0$ donnée précédemment, et est également vérifiée dans le cas d'une interface métal-diélectrique.

Nous venons ainsi de donner les conditions rigoureuses d'existence du plasmon de surface dans une géométrie de réflexion totale.

À partir des composantes calculées des champs électromagnétiques associés aux plasmons de surface, nous allons donner des ordres de grandeur des distances associées à ces modes, ainsi que quelques propriétés physiques caractéristiques.

1.2.3 Relations de dispersion

Les relations de dispersion sont considérées pour deux cas : une interface à deux milieux semi-infinis et une couche mince entre deux milieux :



Figure1.3 : géométrie d'un composant à deux milieux semi-infinis et une couche mince entre deux milieux.

1.2.3.1 Système à deux milieux semi- infinis

La relation de dispersion pour un mode de surface TM (Transverse Magnétique) s'écrit :

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\dot{\varepsilon_m} \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}}$$
 1.18

Si $\omega_{\pm} \rightarrow \omega_p / \sqrt{1 + |\varepsilon|}$ le dénominateur de cette relation tend vers zéro et, par conséquent, k_x devient infini. Il s'agit donc d'une fréquence propre de l'interface métal/diélectrique. La Figure 1.4 suivante donne l'interprétation graphique de cette relation de dispersion pour un métal dont la permittivité est décrite selon le modèle de Drude- Lorentz- Sommerfeld $\varepsilon_m = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$ (conducteur idéal (sans perte))



Fig1-4 : Relations de dispersion de SPs pour une interface métal/air [31]

la fréquence maximale de l'onde de surface, qui peut se propager le long d'une interface (métal/vide) avec $\varepsilon_d = 1$ est $\omega_{ps} = \omega_p / \sqrt{2}$. En effet,

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon'_m}{\varepsilon'_m + 1}} \to \infty \quad \text{si } \varepsilon'_m \to -1$$
 (1-19)

et d'autre part,

$$\varepsilon_m = 1 - \omega_p^2 / \omega^2 \rightarrow -1 \quad \text{si} \quad \omega \rightarrow \omega_p / \sqrt{2}$$
 (1-20)

Le mode de propagation des plasmons de surface évolue dans une forme non linéaire pour atteindre une fréquence angulaire d'oscillation constante nettement inférieur à la fréquence plasma.

1.2.3.2 Système à trois milieux :

une couche mince entre deux milieux semi- infinis



Fig.1-5 : Système à trois milieux.

L'application des équations de Maxwell à ce système conduit aux équations différentielles du second ordre, [14-32, 30] :

- pour la polarisation TE (s) de l'onde incidente :

$$\frac{\partial^2 E_y(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - k_x^2) E_y(z) = 0$$
 1-21

- pour la polarisation TM (p) de l'onde incidente

$$\frac{\partial^2 H_y(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - k_x^2) H_y(z) = 0$$
 1-22

où $(E_y \text{ et } H_y)$ sont les composantes transversales du champ électromagnétique.

La relation de dispersion peut être déduite des équations aux valeurs propres associées à ces équations différentielles, qui s'écrivent alors [30] :

- pour le cas d'une polarisation TE (s) :

$$\tan(k_{z2}d/2) = \frac{k_{z1}/k_{z2} + k_{z3}/k_{z2}}{1 - (k_{z1}/k_{z2})(k_{z3}/k_{z2})}$$
1-23

- et pour le cas d'une polarisation TM (p) :

$$\tan(k_{z2}d/2) = \frac{k_{z1}\varepsilon_2/k_{z2}\varepsilon_1 + k_{z3}\varepsilon_2/k_{z2}\varepsilon_3}{1 - (k_{z1}\varepsilon_2/k_{z2}\varepsilon_1)(k_{z3}\varepsilon_2/k_{z2}\varepsilon_3)}$$
 1-24

Où :

$$k_{z2} = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_2 - k_x^2}$$
 et $k_{z1,3} = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon_{1,3} k_0^2}$ 1-25

Les dernières équations sont transcendantales. Leurs solutions ne peuvent être obtenues que par un calcul numérique. Ainsi, même dans ce cas semblant simple, les relations de dispersion écrites sous une forme analytique sont extrêmement compliquées, voire peu utiles. C'est pour cette raison que retrouver une solution du problème par une méthode purement analytique, dans le cas d'un capteur **micromécanique** à effet SPR, devient quasiment impossible.

1.2.4 Excitation des plasmons de surface

Les relations de dispersion, données ci-dessus pour l'interface métal/diélectrique, montrent que l'impulsion de plasmons de surface est toujours supérieure à l'impulsion de l'onde lumineuse progressive dans le diélectrique. En effet, compte tenu que la partie réelle de la permittivité ε'_m d'un métal est toujours négative, on a :

$$\epsilon'_{\rm m} < 0 \quad \Rightarrow \quad k_{\chi} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon'_{\rm m} \epsilon_{\rm d}}{\epsilon'_{\rm m} + \epsilon_{\rm d}}} > \frac{\omega}{c} \quad \Rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon'_{\rm m} \epsilon_{\rm d}}{\epsilon'_{\rm m} + \epsilon_{\rm d}}} > \sin \theta$$
 1-26

Quelle que soit θ

Où θ est l'angle d'incidence, ε_d est la permittivité du milieu diélectrique.

Alors :

 $k_x \neq k_{sp}$ Quelle que soit θ

Dans le cas d'un système à deux milieux, une excitation directe des plasmons de surface par une onde lumineuse progressive est impossible quelque soit l'angle d'incidence. Cela est illustré graphiquement sur la Figure.(1-4) qui réunit les deux courbes.



Figure.1-6 : Courbes de dispersion de SPs et d'une onde lumineuse progressive dans un milieu diélectrique.[31]

Le figure(1-6) montre que les courbes de dispersion de SPs et de l'onde lumineuse progressive ne peuvent pas avoir un point d'intersection (compte tenu que $\sin \theta \le 1$ Quelle que soit θ). Pour que l'intersection entre les courbes de ce graphique ait lieu, il est donc nécessaire de diminuer la pente de la courbe k_x associée à la relation de dispersion de l'onde lumineuse. Cela reviens à augmenter l'impulsion du photon associé à ce vecteur d'onde pour parvenir à générer un plasmon. Cela est tout-à-fait impossible dans le cas d'une onde progressive, dont le vecteur d'onde maximal est ω/c

Cependant, cela devient faisable dans le cas d'une onde lumineuse évanescente. Cela s'explique par le fait que la norme d'un nombre complexe est supérieure à sa partie réelle.

Une conversion d'une onde progressive en onde évanescente peut avoir lieu soit lorsque une diffraction, par exemple sur une inhomogénéité microscopique (microparticules, trous, cavités...), sur un réseau de diffraction, sur un bord d'un objet etc., soit lorsque une réflexion totale à une interface entre deux milieux (plane ou non- plane, comme par exemple dans le cas des fibres optiques). Chacun de ces phénomènes peut être utilisé, en principe, pour réaliser un couplage optique entre une onde lumineuse incidente et des SPs.

Parmi différents coupleurs optiques qu'on peut trouver dans la littérature [14-22, 30-31,33] uniquement ceux d'une géométrie plane sont exploitables dans un système d'imagerie. Les autres géométries de coupleurs ne permettent pas, en règle générale, de fournir une distribution spatiale homogène du champ optique sur l'ensemble de pixels du détecteur. Alors, dans cette

étude, on ne s'intéresse qu'aux coupleurs à faces planes. Il est important de noter que dans ce cas, le coupleur optique doit former dans une interface plasmonique une onde évanescente de polarisation TM (p). Dans le paragraphe suivant, nous présentons quelques unes des techniques de couplage optique qu'on pourra utiliser dans le capteur micromécanique proposé.

1.2.5 Couplage optique en mode de réflexion totale atténuée

Dans le couplage en mode de réflexion totale atténuée, on excite les SPS à une interface métal/diélectrique par un champ électromagnétique évanescent créé lorsqu'une réflexion interne totale d'une onde lumineuse progressive se produit.

Deux types de configurations du multicouche sont possibles pour observer la résonance de plasmons de surface : la configuration proposée par Kretschmann-Raether et celle proposée par Otto, [14-22, 30-33] (Fig 1-8).

Dans la première configuration, une couche métallique est mise en contact avec un coupleur optique au choix (un prisme, un demi- cylindre, une fibre...) et dans la deuxième, cette couche et le coupleur sont séparés par un gap d'une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde. Le schéma du couplage optique et la structure de multicouches dans ces deux configurations sont donnés sur les Figure.(1-7) et Figure.(1-8)



Figure 1-7: Couplage optique par un prisme.



Figure 1-8 : Structure du multicouche plasmonique : A- dans la configuration de Kretschmann-Raether ; B- dans la configuration d'Otto

Le principe du couplage est expliqué géométriquement sur la Figure.1-7 :



Figure 1-9 : Principe de couplage optique.

Dans ces dispositifs, une onde lumineuse progressive polarisée **p**, en passant à travers un prisme sous un angle d'incidence θ supérieur à l'angle critique θ_c du régime de réflexion intérieure totale, se transforme en une onde évanescente à l'interface métal/diélectrique. Si dans un multicouche plasmonique Figure.(1-7) l'épaisseur de la couche adhérant au prisme est faible devant la profondeur de pénétration du champ, une excitation résonnante par cette onde évanescente devient possible. Ce phénomène a lieu pour un angle d'incidence, tel que deux courbes de dispersion se croisent (le point **M** sur la Figure.(1-8). Le SPR se traduit par un accroissement de l'efficacité du transfert d'énergie de l'onde lumineuse à SPs. Ce qui explique l'apparition d'un pic d'absorption sur le spectre angulaire de la réflectivité du multicouche Figure.(1-10). Notons qu'un bon choix de paramètres optiques du système permet même d'annuler sa réflectivité à un certain angle d'incidence.





La position angulaire du pic d'absorption (θ_{SPR}) est sensible principalement à la partie réelle des permittivités diélectriques des milieux du multicouche. La largeur à mi-hauteur du pic, quant à elle, est quasiment proportionnelle à la partie imaginaire des permittivités de ces milieux. [31]

La fréquence maximale de SPS qu'on peut exciter par une onde lumineuse varie en fonction de l'indice du prisme ($n_p = \sqrt{\varepsilon_p}$). Afin de trouver cette fréquence, on pose sin $\theta = 1$ et.

$$\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_p} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon_m'}{\varepsilon_m'+1}}$$
 1-27

Comme $\varepsilon_m = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$

Donc on trouve,:

$$\omega_{s(Max)} \approx \omega_p \sqrt{\frac{\varepsilon_p - 1}{2\varepsilon_p - 1}}$$
 1-28

par exemple : cas un prisme de BK-7

$$(n=1.5), \quad \omega_{s(Max)} \approx 0.128\omega_p \text{ et pour } n=1.7 \quad \omega_{s(Max)} \approx 0.165\omega_p$$

L'angle SPR (θ_{SPR}) pour une interface plane « métal /diélectrique » peut être évalué comme suit :

- Dans le cas où vecteur (ksp) se propageant le long de l'interface on a :

$$k_{sp} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm m}\varepsilon_{\rm d}}{\varepsilon_{\rm m} + \varepsilon_{\rm d}}} = k_{sp}' + ik_{sp}''$$
 1-29

Où

$$k_{sp}' = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm m}}{\varepsilon_{\rm m}} + \varepsilon_{\rm d}}$$
 1-30

$$k_{sp}^{"} = k_0 \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{\rm m} \varepsilon_{\rm d}}{(\bar{\varepsilon}_{\rm m}^{'} + \varepsilon_{\rm d}}\right)^{3/2} \frac{\dot{\varepsilon}_{\rm m}^{"}}{2\varepsilon_{\rm m}^{'2}}$$
 1-31

 k_{sp} est un vecteur d'onde de SPs et $k_{sp}^{'}$ parte réel , $k_{sp}^{''}$ parte imaginaire où k_0 est le vecteur d'onde du faisceau lumineux

-la composante tangentielle du vecteur d'onde du faisceau incident est :

$$k_x = k_0 \cdot n_p \cdot \sin \theta \qquad 1-32$$

Donc, la condition principale de SPR $k_x = k_{sp}$, l'angle d'incidence θ_{SPR} est tel que :

$$k_0 \dots \sin \theta_{SPR} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm m} \varepsilon_{\rm d}}{\varepsilon_{\rm m} + \varepsilon_{\rm d}}}$$
 1-33

On trouve :

$$\theta_{SPR} = \arcsin\left(\frac{1}{n_p} \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm m}^{'} \varepsilon_{\rm d}}{\varepsilon_{\rm m}^{'} + \varepsilon_{\rm d}}}\right)$$
 1-34
1.2.6 Couplage optique par un réseau de diffraction

Le couplage optique par un réseau en relief métallisé est une autre méthode d'excitation de SP et, certainement, plus avantageuse que le couplage par un prisme en matière de miniaturisation éventuelle de capteurs, [34, 30]. Comme dans le cas du couplage optique par un prisme, le SPR aura lieu lorsque la condition formulée par l'équation (2.1) sera remplie. Ceci est possible si la projection tangentielle du vecteur d'onde de l'un des ordres de diffraction k'_{xm} du réseau devient égale à la norme du vecteur d'onde des SP :

$$k'_{xm} = k'_{SP}$$
 1-35

Cette projection tangentielle s'exprime comme suit :

$$k'_{xm} = k_x + mG 1-36$$

 \vec{G} est le vecteur d'onde du réseau ; k_x est la projection tangentielle du vecteur d'onde du faisceau incident.

Dans le cas d'un réseau sinusoïdal, la position angulaire d'un ordre de diffractions *m* s'exprime comme suit :

$$\beta_{\pm 1} = \arcsin\left[\pm\frac{\lambda_0}{nd}m - \sin\alpha\right]$$
 1-37

où λ_{θ} est la longueur d'onde du faisceau incident, *n* est l'indice de réfraction du milieu adjacent, *d* est le pas du réseau Fig.1-11



Figure 1-11: Ordres de diffraction d'un réseau.

Donc, le couplage entre des SP et l'ordre de diffraction *m* aura lieu si :

$$n\sin\theta + m\frac{\lambda}{d} = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_r n^2}{\varepsilon_r + n^2}} + \Delta n_{eff}$$
 1-38

où Δn_{eff} dénote une perturbation de l'indice effectif de SPs due à présence du réseau, [30].



Figure. 1-12 : Principe du couplage optique par un réseau de diffraction.[31]

l'angle de SPR d'un réseau métallisé est exprimé par la relation suivante:

$$\theta_{SPR} \approx \arcsin\left(n^{-1}\left[\sqrt{\frac{\varepsilon_r n^2}{\varepsilon_r + n^2}} \pm m\frac{\lambda_0}{d}\right]\right) = \arcsin\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_r + 1}} \pm \frac{\lambda_0}{d}\right) \qquad 1-40$$

Les conditions sont telles que : n=1 (air) et $m=\pm 1$

1.2.7 La résonance plasmon de surface (SPR) et ses applications

De nombreuses applications basées sur le principe de la résonance de plasmons de surface (SPR) ont été développées pendant ces dernières années. Elles varient de la détection des molécules aux études des propriétés de surface des couches minces (ultrafines) et la modification des surfaces et les interactions biomoléculaires.

La technique SPR a été utilisée en mode optique imagé où l'épaisseur et les propriétés diélectriques des couches adsorbées peuvent être résolues dans l'espace. Cette technique peut être utilisé dans des applications de la SPR en photonique.

Des travaux de recherches [15-16] sur les applications de la résonance plasmon de surface ont été développés également dans des applications fondamentales et intérêt instrumental.

Toutes les applications de la résonnance de plasmons de surface (SPR ont été développées selon trois thèmes de recherche :

- détection de biomolécules et les mesures biochimiques
- Détection en microscopie et interfaces de surfaces
- Application photonique

1.2.7.1 Détection de biomolécules et les mesures biochimiques

La bio détection en SPR et l'utilisation des biocapteurs a commencé à être étudiée par Lied berg et al [30]. Actuellement, les biocapteurs commercialisés couvrent une zone limitée du marché du contrôle biochimique. Ils sont fondés sur le principe de la SPR. Ils peuvent se montrer compétitifs par rapport aux autres techniques. Parmi les avantages des biocapteurs SPR sont : le faible coût, la facilité d'utilisation, la sensibilité et les mesures en temps réel.

Le phénomène de la SPR est utilisé pour la détection et la quantification des molécules et les analyses biophysiques des interactions biomoléculaires.

Parmi les domaines où les biocapteurs SPR ont été utilisés sont :

- Détection de molécules relevant de l'environnement tel que la détection des polluants chimiques et les contaminants de pesticides et dans la sécurité des populations tel que la détection rapide d'émanations biologiques ou chimiques, comme les toxines, bactéries,...
- Détection des contaminants chimiques et le microorganisme pathogène tel que les bactéries particulièrement dans l'industrie agro- alimentaire et en biotechnologie
- Détection des analytes comme les anticorps et les hormones en médecine.

1.2.7.2 Détection en microscopie et interfaces de surfaces

La microscopie à SPR a été développée pour devenir un instrument d'imagerie des architectures à 2-D de ces couches (e.g. imagerie des cellules). Elle est utilisée pour calculer les distances de contact entre une particule - ou cellule - et le substrat par un système de balayage angulaire classique. (Car les particules, cellules par exemple, interfèrent avec le champ évanescent des PS). Les images sont construites directement et en temps réel à partir des intensités de la SPR

Le confinement du champ électromagnétique de la SPR le long d'une interface est consigné par la forte sensibilité aux conditions paramétriques et géométriques de surfaces qui constituent l'interface. Cette sensibilité est utilisée pour étudier les adsorbants, investiguer la rugosité et les défauts de surface (qualité), étudier le comportement des PS liés et mesurer les propriétés optiques des couches minces.

Des exemples des applications de la SPR en interface sont des s imageries faites pour des particules différentes des couches de lipides [17], des films métalliques [18], des cellules vivantes [19] et des sphères de latex [20]...

Dans de type d'application, la longueur de propagation du SPR est liée à la largeur à mihauteur des courbes de résonance. Comme le montre l'équation 1.41, cette longueur de propagation est décrite par :

$$L = (2k_{xi})^{-1} 1-41$$

Les métaux comme l'argent ayant des courbes pointues, valeurs de k_{xi} faible et une grande longueur de propagation, ne peuvent pas être étudiés par la microscopie SPR.. En outre, les métaux comme Au et Al ayant des larges courbes de résonance, donc de courte longueur de propagation (~2µm pour l'or à 543 nm)[31], sont convenables pour l'imagerie à grande résolution des particules et des cellules. [18,21,22]. Comme les PS ont des champs évanescents, ils ne peuvent pas être observés par des microscopes à champ lointain classiques sauf si les PS sont convertis en lumière par l'interaction avec des inhomogénéités de surface par exemple [14]. La structure microscopique des surfaces étant en générale inconnue, le signal optique mesuré par ces techniques de champ lointain est moyenné par rapport à l'ensemble des caractéristiques de la surface causées par des effets de diffraction; et donc il est possible de surface. C'est justement avec le développement des microscopies à champ proche que l'étude locale des plasmons est devenue possible. En particulier avec le SNOM (Scanning Near-field

Optical Microscopy) Fig(1-13)[23] qui donne la possibilité de sonder le champ des PS directement sur la surface où ils se situent [24-25].



Figure. 1-13: *M*icroscope à balayage à effet tunnel optique (PSTM)

Ce détecteur a permis la visualisation des phénomènes des PS tels que leur diffraction, les interférences, la rétrodiffusion, et la localisation [24], en corrélant le comportement des PS avec la structure de la surface.

1.2.7.3 Applications photonique

Une application des PS consiste à combiner des capteurs à SPR avec des concepts d'optique intégrée. L'idée c'est d'utiliser des modes guidés comme source d'excitation des PS à une interface typique métal/diélectrique [28] Figure (1-14).

Les propriétés des PS - en particulier leur interaction avec la lumière – peuvent être adaptées à la photonique miniaturisée [26]. La nature bidimensionnelles des PS confère une flexibilité considérable quant à l'ingénierie des circuits optiques intégrés en photonique et optoélectronique e.g. la communication optique, l'optique sub-longueur d'onde, le stockage des données, génération de lumière avec des dispositifs de dimensions nanométriques [27].La propagation des PS est contrôlée par l'utilisation des ensembles de micro-réseau, de matrice de nanoparticules alignées, des nanoparticules arrangées périodiquement ou des matrices aléatoires.



Fig. 1-14: Modification de la distribution du champ d'un mode guide d'onde simple à un mode guide d'onde associée à un PS [28].

1.3.Synthèse bibliographique

Les plasmons de surface objet de cette étude ont été étudiés par plusieurs auteurs pendant ces dernières années tant en couplage qu'en applications. Nous pouvons citer quelques travaux comme suit :

J. Zenneck (1907) et A. J. W. Sommerfeld (1909) démontrèrent (théoriquement) qu'une onde électromagnétique de radio fréquence apparaissait à l'interface de deux milieux lorsque l'un des deux est un métal ou un diélectrique absorbant et l'autre un milieu non absorbant. Puis, en 1939, U. Fano montra que les ondes électromagnétiques surfaciques à l'interface métal/air étaient évanescentes (leurs vecteurs d'ondes étant supérieurs à celui de l'onde incidente, les « Wood's Anomalies ») et qu'un réseau de diffraction pouvait augmenter le vecteur incident pour qu'il puisse se coupler avec l'onde électromagnétique surfacique [11].

R. H. Ritchie en 1957 démontra théoriquement l'existence de plasmons transversaux à la surface d'un métal [35]. Tandis que E. A. Stern et R. A. Ferrell en 1958 montrèrent, aussi théoriquement, le rôle du couplage d'un rayonnement électromagnétique avec les plasmons de surface à une interface métallique [36]. En particulier, ils calculèrent pour la première fois la relation de dispersion des ondes électromagnétiques à la surface d'un métal. En utilisant un faisceau électronique monocinétique,

Powell et Swan (1960) observèrent expérimentalement l'excitation des plasmons de surface à une interface métallique [37]. Tandis que A. Otto (1968) proposa, quant à lui, une configuration expérimentale fondée sur l'utilisation d'un prisme - nommée FTR (Frustrated Total Reflection) - mettant en évidence les plasmons de surface par leur couplage avec une onde électromagnétique [32].

E. Kretschmann (1971) modifia et simplifia ensuite la géométrie de Otto, en se basant sur une configuration dite ATR ('Attenuated Total Reflection') [38]. Jusqu'à nos jours, cette dernière géométrie reste la plus utilisée.

Dans les années qui suivirent, ce sujet a connu un regain d'intérêt si l'on en croit le nombre important de publications qui y furent consacrées. L'intérêt fondamental a cependant fléchi dans les années 90 pour se reporter sur des études avec des objectifs plus appliqués, telle que la spectroscopie Raman exaltée de surface (SERS) [39,40]. Encore plus récemment, le développement des techniques à sonde locale a permis d'approfondir les connaissances sur le sujet. Par la suite, des investigations systématiques amenèrent à la renaissance des recherches sur les plasmons de surface, en partie motivée par des applications émergentes dans des disciplines diverses (optoélectronique, capteur,...)

1.4. Conclusion

Les plasmons de surface ont connus un développement dans la recherche en raison de leur domaine d'application ou la conception des dispositifs d'excitation s'appuyant sur les technologies fiables de nanostructuration des matériaux dans leurs diversités optiques. Les conditions d'excitation des plasmons dépendent de plusieurs paramètres tels que la permittivité des matériaux en couches minces dont la partie réelle soit négative et les épaisseurs des couches. La génération des plasmons est consignée par l'emploi des instruments de couplage : soit par la réflexion totale atténuée (par prisme optique), soit par un réseau métallique.

Les applications majeurs reconnues aux structures plasmoniques sont :- la microscopie de caractérisation et 'investigation des interfaces et surfaces, la détection des effets biochimiques et biologiques.

Après cette description des notions fondamentales sur la spectroscopie des plasmons dans les structures multicouches planes, nous abordons le chapitre suivant pour présenter les propriétés optiques des matériaux (nobles et dopés) sur lesquelles reposent notre simulation.

Chapitre II Propriétés optiques des matériaux nobles et dopés

II-1. Introduction

Les propriétés optiques et les mécanismes fondamentaux d'interactions électroniques. de certains matériaux solides comme les métaux nobles ou les solides semi-cristallins ont été étudiés par plusieurs chercheurs, particulièrement la résonance plasmon de surface de ces matériaux. Les propriétés optiques des métaux nobles, décrites par leur constante diélectrique, sont intrinsèquement reliées à celles des électrons et dans une moindre mesure à celles du réseau cristallin. Les matériaux semi-conducteurs ont des propriétés intermédiaires entre conducteur et isolants. Ils sont caractérisés d'une part, par une bande interdite entre la bande de conduction et la bande de valence et d'autre part, par une conductivité moyenne.

II-2. Propriétés des matériaux nobles

Les propriétés des métaux noble sont été longuement étudiées en régime permanent pour les métaux nobles massifs[41],[42] et confinés[43] ; de nombreuses études restent à faire en régime non stationnaire. Nous nous intéresseront dans ce chapitre à présenter certaines propriétés optiques et électroniques des métaux nobles tel que les éléments Ag, Au, Cu. Nous présenterons les propriétés spécifiques des systèmes confinés et notre approche pour modéliser ces systèmes. Nous discuterons ensuite de la mise hors d'équilibre du gaz d'électrons quasi-libres par absorption d'une impulsion femtoseconde, puis nous présenterons un modèle de retour à l'équilibre basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann prenant en compte les interactions entre les électrons et entre les électrons et le réseau. Enfin, nous relierons cette dynamique à celle des propriétés optiques du matériau.

II-3. Propriétés optiques des matériaux nobles.

Les propriétés optiques des matériaux nobles peuvent être montrées lorsque une onde plane monochromatique de pulsation ω , incidente sur un milieu métallique, induit une polarisation caractérisée grâce à la constante diélectrique complexe, qui se réduit à une fonction scalaire de la pulsation pour un milieu isotrope optiquement[46]

$$\boldsymbol{\varepsilon}_m = \boldsymbol{\varepsilon}_m + i\boldsymbol{\varepsilon}_m$$
 2-1

l'équation de La propagation de l'onde:

$$\Delta \vec{E} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \vec{E} = \vec{0}$$
 2-2

La solution de cette équation est donne par (2-19) :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left[i\omega\left(\frac{n}{c}z - t\right)\right] \operatorname{avec} \tilde{n}^2 = (n + ik)^2 - \varepsilon_m \qquad 2-3$$

Cette solution Elle permet de définir l'indice complexe **n**du milieu. Le coefficient d'absorption, relatif à l'intensité vaut alors:

$$\alpha = 2 \frac{\omega}{c} k$$
 2-4

Dans les métaux, on distingue deux types d'interactions lumière/matière associés à deux types de transition (Figure I-1); l'un d'eux, dit interbande, concerne les transitions électroniques induites par l'absorption d'un photon entre deux bandes d'énergie, généralement entre la bande de valence et la bande de conduction, l'autre dit intrabande, concerne les transitions électroniques qui ont lieu à l'intérieur même de la bande de conduction. Cette dernière contribution est souvent décrite par le modèle de Drude, les électrons de conduction ayant un comportement d'électrons quasi-libres[46].

II-3.1. Modèle de Drude.

Ce modèle décrit le gaz métallique dense d'électrons quasi-libres avec les méthodes de la théorie cinétique d'un gaz dilué neutre avec quelques modifications mineures. Les hypothèse fondamentales[44] sont :

Entre deux collisions, l'interaction d'un électron donné avec d'une part les autres électrons et d'autre part les ions est négligée .L'approximation consistent à négliger les interactions électrons- électrons entre les collisions est connue sous le nom d '« approximation des électrons indépendants » et celle correspondant aux interactions électrons-ions est dite « approximation des électrons libres ».

- Les collisions dans le modèle de Drude comme dans la théorie cinétique sont des évènements instantanés qui changent de manière abrupte la vitesse d'un électron

- Nous supposons qu'un électron prend part à une « collision » avec une probabilité par unité de temps $1/\tau$. Le temps τ est connu sous différentes dénominations telles que temps de relaxation, temps de collision ou temps de libre parcours moyen[52].

- On suppose que les électrons établissent un équilibre thermique uniquement par le biais des « collisions ». Ces collisions sont supposées maintenir l'équilibre local[52]. L'interaction électrons-ions décrite par Drude (l'électron entre en collision avec les ions) est incluse dans le calcul de la structure de bande électronique à l'équilibre ; seule l'interaction électron-phonon doit être incluse, c'est-à-dire pour un mouvement des ions hors de leur position d'équilibre[44]. Par rapport aux hypothèses de Drude, on comprend bien que les « collisions » qu'il suppose ne peuvent être de simples chocs entre électrons. On peut adapter le modèle en supposant l'existence de certains mécanismes de diffusion dont on ne précise pas forcément la nature mais que l'on traduit en fait par une force de frottement fluide de temps caractéristique τ , que l'on exprimera plus souvent en énergie .

$$\hbar \gamma = \hbar / \tau \qquad 2-5$$

Le mouvement classique d'un électron de masse effective *m* soumis à un champ électrique *E* est alors donné par l'équation de Newton[46]

$$m\frac{d\overline{v}}{dt} = -\frac{m}{\tau}\overline{v}^* - e\overline{E}^*(t)$$
 2-6

Cette équation est valable pour un électron ; en fait, on a besoin de $\langle v \rangle$, moyenne sur l'ensemble des électrons. Or les collisions électron-électron conservent généralement le vecteur d'onde *k* (processus normaux) ; en conséquence, nous avons alors $\langle v \rangle$ -constante. En régime stationnaire, la polarisation induite à la fréquence ω s'écrit

$$\vec{F}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \vec{E} = -ne\vec{r}$$
 2-7

et permet de définir la constante diélectrique relative $\epsilon(\omega)$ soit

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$$
 2-8

Avec

$$\omega_p^2 - n e^2 / \epsilon_0 m \qquad 2-9$$

fréquence plasma du métal.

Dans le domaine optique, on a $\omega \gg \gamma$ d'où

$$\varepsilon' \approx -\frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$
 et $\varepsilon'' \approx \frac{\omega_p^2}{\omega^3} \gamma$ 2-10

Dans l'infrarouge, l'énergie du photon est très inférieure au seuil des transitions interbandes dans les métaux nobles Tableau(2-1) et la contribution interbande de la constante diélectrique est négligeable.

La mesure de sa partie réelle ε_1 permet donc de déduire ω_p et par suite, la valeur de la masse effective des électrons .On retrouve aussi dans le cadre de cette approximation que

l'absorption $\alpha = \omega \varepsilon_0 \varepsilon_2$ est proportionnelle à γ , c'est-à-dire à l'amortissement du mouvement électronique.

Le modèle de Drude, bien que reposant sur une approche classique est peu adaptée au cas des électrons dans un solide avec une introduction phénoménologique des collisions électroniques, est connu pour donner des résultats tout à fait satisfaisants. La Figure(2-1)permet de comparer ceux-ci avec les valeurs expérimentales dans le cas de l'argent

Tableau 2-1 : Paramètres caractéristiques de la structure de bandes(fréquence plasma, seuil des transitions inter bandes et constante diélectrique inter bande à
fréquence nulle) pour trois métaux nobles .[52]

Métal	$\hbar\omega_p$ (eV)	$\hbar\Omega_{ib}~(\mathrm{eV})$	ε ₀ ^{<i>ib</i>}
Ag	8,98	3,9	3,7
Au	9,01	2,4	6,7
Cu	8,82	2,1	5,8



Figure 2-1 : Parties réelle et imaginaire de l'indice complexe (n et k)et de la constante diélectrique (ε1et ε2) mesurées dans l'argent[41].

La courbe en pointillés correspond à la contribution intrabande estimée par le modèle de Drude. L'insert représente la partie interbande déduite de ces mesures[42]

Nous avons défini un temps de relaxation τ , supposé dans le modèle de Drude indépendant de tout autre paramètre. Cette hypothèse est simpliste et de façon générale, τ dépend de la fréquence ω ; il est alors important de distinguer le temps de collision optique $\tau(\omega)$ et le temps de collision statique $\tau(0)$ qui régit les propriétés du métal en régime continu (conductivité par exemple). Le premier correspond à des collisions à trois particules (pour des fréquences optiques, le vecteur d'onde du photon étant négligeable par rapport à celui qui doit être échangé par un électron lors de l'absorption, l'intervention d'une troisième quasi particule est nécessaire pour assurer à la fois la conservation de l'impulsion et de l'énergie) :un photon, un électron et un phonon par exemple ; le fait que α soit proportionnel à γ dans le modèle de Drude reflète cette absorption d'un photon assisté par collision entre un électron et un phonon. Le second correspond à des collisions à deux corps : électron/électron ou électron/phonon. Les ordres de grandeur de ces deux constantes de temps sontasez proches à température ambiante, mais leurs dépendances en fonction de la température électronique T_e sont très différentes. En effet, pour une énergie de photon $\hbar\omega$ grande devant l'énergie thermique k_BT_e , le taux de collisions optique sera peu sensible à la distribution électronique autour du niveau de Fermi ; à l'inverse, les collisions à deux corps sont, à cause des effets de blocage de Pauli, localisées autour du niveau de Fermi et donc très sensibles à la température électronique. Dans les deux cas cependant, c'est l'interaction électrons/phonons (ou électrons/surfaces pour les milieux confinés) qui est prépondérante. Les dépendances en fonction de la température du réseau (ou de la température du système thermalisé) de ces deux types d'interactions sont très proches car déterminées par la population des phonons[52].

II-3.2. Méthode RPA.

Si l'on veut aller au delà du modèle de Drude des électrons libres et indépendants, on peut utiliser l'approche dite de la phase aléatoire (« Random Phase Approximation »). C'est une théorie de champ moyen qui permet de décrire plus correctement le gaz d'électrons en interaction[48].

On pourra décrire l'onde électromagnétique incidente par une onde plane faiblement amortie de pulsation ω et de vecteur d'onde q. Le changement d'énergie potentielle que cette onde induit pour les électrons sera traité par une méthode perturbative ; il s'écrit :

$$\varepsilon$$
 $(\omega, q \to 0) = 1 - \frac{\hbar^2 n \epsilon^2}{\hbar^2 \omega^2 m \epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ 2-11

Cette expression est bien similaire à l'expression obtenue dans le modèle de Drude. On ne peut cependant pas retrouver la partie imaginaire, car dans les deux modèles l'amortissement est introduit de façon phénoménologique[49],[50],[51].

II-3.3. La résonance plasmon de surface pour les métaux nobles.

La résonance plasmon correspond à une très forte augmentation du champ électrique à l'intérieur de la particule[52]. Du point de vue classique, ce champ induit une oscillation du nuage électronique. La fréquence Ω_R correspond à la fréquence propre d'oscillation du système.

L'existence de cette résonance est due aux conditions aux limites imposées aux champs sur les surfaces d'où son nom. Elle se distingue en cela de la résonance plasma du matériau massif[52].

Cette résonance ne concerne pas que les électrons de conduction, mais aussi les électrons liés (cf.(1-45) [46].de part leur contribution à $\boldsymbol{\varepsilon}'(\Omega_R)$,

$$\varepsilon'(\Omega_R) + 2\varepsilon_m = 0 \qquad 2-12$$

via le terme interbande de la constante diélectrique Tableau .(2-1). D'un point de vue physique, ceci correspond au fait que l'oscillation de la densité de charges concerne à la fois les électrons libres et les électrons de valence[46].

En utilisant l'approximation de Drude pour la partie intrabande de la constante diélectrique

$$\varepsilon' = \varepsilon'^{1b} - \omega_p^2 / \omega^2$$
 2-13

on déduit de (2-28.) une formule implicite de la position de la RPS :

$$\Omega_{R} = \frac{\omega_{p}}{\sqrt{\varepsilon^{\gamma b}(\Omega_{R}) + 2\varepsilon_{m}}}$$
2-14

Ainsi, pour des métaux similaires du point de vue des électrons de conduction comme l'or et l'argent, et pour une même matrice, la RPS est déplacée autour de **2eV** par la contribution des électrons liés pour le premier et autour de 3 eV pour le second[46].

Dans le cas de l'argent, nous verrons que cette résonance est alors très nettement séparée de l'absorption interbande (seuil autour de 4 eV) et apparaît comme une exaltation de l'absorption intrabande, très faible à ces énergies dans le matériau massif. Cette caractéristique de résonance pour les nanocristaux d'argent permet de les utiliser pour l'étude sélective de la RPS elle-même ou de celle des effets de confinement détectables sur les transitions interbandes[52].

On peut, à ce stade, définir la largeur de la raie plasmon à l'aide du taux de collision électronique global γ' . On peut en effet écrire la constante diélectrique sous la forme :

$$\varepsilon'(\omega) = \varepsilon'^{ih}(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$
 2-15

et

$$\varepsilon''(\omega) = \varepsilon''^{ib}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\gamma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\gamma'(\omega)$$
 2-16

Dans le cas de l'argent, où la RPS est nettement séparée des transitions interbandes, on peut négliger la dispersion de la constante diélectrique interbande ε ⁽¹⁾ et du taux de collision γ '. En substituant les expressions (2-31) dans (1.45)[46]., on montre alors que la RPS a une forme quasi lorentzienne [53]

de largeur γ ':

$$\alpha(\omega) \approx \frac{9p_v n_m^8}{c_0 \omega_p^2} X \frac{\omega^2 \Omega_R^4 \gamma_R^2}{\left(\omega^2 - \Omega_R^2\right)^2 + \left(\frac{\gamma_R \Omega_R^2}{\omega}\right)^2}$$
 2-17

Le terme γ ' prend en compte toutes les formes de collisions électroniques, y compris celles, spécifiques aux nanoparticules, induites par la présence des surfaces.

Dans les cas de l'or ou du cuivre, où la RPS est beaucoup plus proche des transitions inter bandes, cette approximation n'est plus valable ; la raie n'a plus une forme quasi lorentzienne et il est difficile de définir une largeur

II-4. Propriété optique des matériaux dopés

. Les semi-conducteurs sont caractérisés d'une part, par une bande interdite entre la bande de conduction et la bande de valence et d'autre part, par une conductivité moyenne. Les semiconducteurs ont des propriétés intermédiaires entre conducteur et isolants. La résistivité électrique est comprise entre 10^{-4} et $10^{-6} \Omega$.m; elle est supérieure à celle des conducteurs (10^{-8} Ω .m) et inférieure celle des isolants ($10^{22} \Omega$.m).

II-4.1. Types de semi conducteurs

Un concept important qui intervient pour les semi conducteurs est celui du niveau de Fermi, E_f . On le définit comme l'énergie pour laquelle la probabilité d'occupation d'un niveau énergétique est $\frac{1}{2}$. Pour un semi-conducteur de type *n*, E_f se trouve légèrement au-dessous de la limite de bande de conduction. De même, pour le semi-conducteur de type *p*, E_f se trouve juste au-dessus de la limite de la bonde de valence.

II-4.1.1. Semi-conducteurs de type n

Dans ce type de semi-conducteurs, la conductivité électrique peut être attribuée aux électrons de la bande de conduction, qui sont les transporteurs principaux, les trous qui participent dans une moindre mesure à la conductivité sont les transporteurs secondaires[56]. Lorsqu'on dope un cristal de silicium avec une quantité minime de phosphore, les atomes de phosphore comportent 5électrons de valence, tandis que les atomes de silicium ont 4 électrons. Pour s'intégrer à la structure du silicium, chaque atome de phosphore doit céder un électron. Comme l'indique l'illustration dans la figure 2-2, Le niveau d'énergie des atomes de phosphore dits donneurs est très proche de la bande de conduction. L'énergie thermique peut à elle seule entraîner le passage des électrons de valence (supplémentaire) à la bande de conduction et les atomes de phosphore se transforment en ions immobiles, P⁺[54].



Figure 2-2 : Bandes d'energie d'un semi-conducteur extrinsèque de type <n>.

II-4.1.2. Semi-conducteurs de type p

Introduisons dans un cristal un atome de l'aluminium qui n'a que de 3 électrons dans sa couche externe. Il mettra en commun ses 3 électrons avec les 3 des 4 de silicium voisins, la figure 2-3 indique que le niveau d'énergie des atomes d'aluminium, dit accepteurs, se situe légèrement au-dessus de la bande de valence. Les électrons passent donc facilement de la bande de valence au niveau accepteur, ou ils forment des ions négatifs immobiles (Al⁻) et se crée simultanément des photo trous dans la bande de valence. Etant donné que la conductivité électrique dans les semi-conducteurs de ce type p est essentiellement attribuable au déplacement des photo trous [54].



Figure 2-3 : Bande d'énergie d'un semi-conducteur extrinsèque de type .

II-4.2. Bandes d'énergie et les semi-conducteurs

Les propriétés électroniques des solides sont habituellement décrites en termes de modèles des bandes, qui traitent du comportement d'un électron évoluant dans le champ crée par le noyau atomique et tous les autres électrons [52-53].

La figure 2-4 indique qu'un isolant électrique comporte une bande de conduction dont le niveau d'énergie est beaucoup plus élevé que celui de la bande de valence. Peu d'électrons acquièrent suffisamment d'énergie pour franchir la largeur de la bande interdite (E_g), située entre ces deux bandes. Les isolants sont donc de très mauvais conducteurs d'électricité. Cependant, pour une situation dans laquelle la largeur de la bande interdite est faible à franchir, le matériau peut conduire plus au moins l'électricité. Cette situation correspond à la bande d'énergie d'un semi-conducteur[54].



Figure 2-4: Structure des bandes dans A- les isolants et B- les semi-conducteurs.

II-4.3. Dopage des semi-conducteurs :

Le dopage par addition des substances en quantité contrôlée conduit à une amélioration de la capacité des semi-conducteurs pour le transport du courant [55]. Ces impuretés (substances) influent sur le nombre d'électrons présent dans la couche externe, leur taille atomique devra être voisine de celle du cristal. Pour le silicium de numéro atomique 14, les dopants possibles sont d'une part, le bore (Z=3) et l'aluminium (13) et d'autre part, le phosphore (Z=15) et l'arsenic (Z=32). La conductivité électrique augmente avec l'augmentation de la quantité d'impuretés introduite dans le cristal. Cependant, au-dessus de 10^{19} atomes de dopants/cm³ (soit 1 pour10000 atomes de silicium), l'édifice cristallin tend à se désorganiser. Il est à noter que le dopage produit deux types de semi-conducteurs.

II-5. Silicium : matériau d'étude

Comme nous sommes intéressés dans notre étude au silicium en tant que matériau d'étude nous présenterons quelques propriétés du silicium.

II-5.1. Etat naturel

Le silicium a été et restera très probablement le matériau dominant dans la technologie des semi-conducteurs [58]. L'abondance riche en silicium dans la nature et sa propriété de toxicité minimale est un avantage commercial le distincte des autres matériaux synthétiques [59]. Notre étude est basée sur le silicium qui est, après l'oxygène, l'élément chimique le plus abondant dans la croute terrestre puisqu'il représente 25,7% de sa masse. Il fait partie de la famille des cristallogènes, son symbole est "Si" et son numéro atomique est "14". Dans la nature, il n'existe pas à l'état pur, mais sous formes composées : soit sous forme de silice, qui est un dioxyde de silicium (SiO₂) et que l'on trouve dans le sable ; soit sous forme de silicates qui sont des sels dérivants de la silice et qui rentrent dans la composition d'une quantité importante de minéraux puisqu'ils constituent 97% de la croute terrestre. Citons entre autres,

le quartz, le talc ou la topaze. Il est de couleur marron foncé sous sa forme amorphe et grisnoir sous sa forme cristallisée, le silicium est quasi insoluble dans l'eau.

II-5.2. Historique des applications du silicium

Son utilisation la plus ancienne est sous sa forme d'oxyde de silicium amorphe pour la fabrication du verre. Il a été, et est, en tant que corps simple, principalement utilisé comme élément d'alliage avec l'aluminium. Près de 55% de la consommation mondiale de silicium est dans l'utilisation industrielle des alliages silicium-aluminium. C'est avec l'arrivée de l'électronique qu'on lui a trouvé de nouveaux usages comme semi-conducteur,[60].

II-5.3. Production du silicium

Le silicium existe essentiellement sous forme oxydée (silicium, sable) et nécessite d'une part d'être réduit et d'autre part, d'être purifié afin d'obtenir un matériau de qualité électronique [61-62].

II-5.3.1. Réduction de la silicium

On réalise une électrolyse dans un four à arc pour atteindre une température assez élevée pour faire fondre la silice. La silice est mélangée à du carbone. Réaction principale:

$$SiO_2 + 2C \rightarrow Si + 2CO$$

Le silicium obtenu a une pureté de 98%, il faut encore le purifier pour obtenir un matériau de qualité électronique [61-62].

II-5.3.2. Purification du silicium

On effectue une purification chimique. Une des méthodes, consiste à faire une distillation à partir de SiHCl₃ (trichlorohydrursilicium) liquide à température ambiante:

Si (solide) + 3HCl
$$\longrightarrow$$
SiHCl₃(gaz) + H₂(gaz)

Le rendement de la réaction est égal à 90%. On a effectué une première purification car des précipités chlorés ne se mélangent pas au (trichlorohydrursilicium). Puis SiHCl₃ (qui a une température d'ébullition faible: 31.8°C) est purifié par distillation fractionnée, il est plus volatile que les chlorures des principales impuretés. Ce (trichlorohydrursilicium), purifié est ensuite réduit pour redonner du silicium[60].:

SiHCl₃(gaz) + H₂(gaz)
$$\longrightarrow$$
 Si (solide) + 3HCl

Chapitre II

Après la distillation, la teneur en impuretés actives est inférieure à 1 ppm, le silicium est alors de qualité électronique. Le silicium pur obtenu (donc intrinsèque) doit maintenant subir un double traitement à la fois d'enrichissement en matériau dopant afin d'en faire du silicium extrinsèque de type P ou N comportant une proportion d'une impureté connue et d'obtenir de plus un monocristal convenablement orienté [61-62].

II-5.4. Principales propriétés du silicium II-5.4.1. Structure de bande

Figure 2-5 est une représentation de la structure de bande du silicium monocristallin localisée autour de la bande interdite [67-68]. La zone orangée représente la bande interdite, les bandes immédiatement au-dessus et en dessous sont respectivement les bandes de conduction et de valence. E_a



Figure 2-5 : Structure de bande du silicium monocristallin.

La figure 2-5 montre que le silicium a un gap indirect. L'énergie de gap, E_{g} , décroît avec la température suivant la relation suivante [63]

$$E_g(T) = E_{g0} - \frac{\alpha T^2}{(\beta + T)}$$
 2-18

Où

$$E_g(0)=1,\!169~eV$$
 , $\alpha=4.9\!\times\!10^{-4}eV/K$, $\beta=655~K$

T : La température en K.

II-5.4.2. Propriétés optiques

✓ Coefficient d'absorption du silicium cristallin

Le coefficient d'absorption du silicium cristallin à température ambiante est illustré dans la Figure 2-6 L'absorption augmente rapidement juste au-dessus de 3 eV et passe par un maximum près de 3.5 eV. Il y a un pic relativement pointu près de 4.3 eV [71].





Le silicium a un gap indirect. Son coefficient d'absorption pour une transition avec absorption d'un phonon est donné par [72]:

$$\alpha_a(hv) = \frac{A(hv - E_g + E_p)^2}{\exp\left(\frac{E_p}{KT} - 1\right)}$$
 2-19

Le coefficient d'absorption du silicium pour une transition avec émission d'un phonon est [72]:

$$\alpha_{g}(hv) = \frac{A(hv - E_{g} - E_{p})^{2}}{1 - \exp\left(-\frac{E_{p}}{KT}\right)}$$
 2-20

Où A est une constante indépendante de l'énergie de phonon. E_p est l'énergie de phonon.

Puisque l'émission et l'absorption d'un phonon ne sont possibles qu'à la condition

$$hv > E_{g} + E_{p}$$
 2-21

alors, on aura un coefficient d'absorption additif comme suit :

$$\alpha = \alpha_a + \alpha_e \qquad 2-22$$

✓ Indice de réfraction réel

La figure 2-7 montre que l'indice de réfraction réel croît lorsque l'énergie des photons augmente. Il passe par un maximum situé autour de 3,4 eV (=365 nm), puis décroît à un minimum situé à 10 eV (=124 nm). L'indice de réfraction réel statique vaut (3-42)[60]



Figure 2-7: Indice de réfraction réel (n) du silicium cristallin en fonction de l'énergie des photons incidents [71]

II-6. Etude comparative entre le silicium et les métaux nobles

Pour ce faire une idée sur l'effet de la concentration des porteurs de charge pour le type de dopage p du silicium, nous avons tracé les profils des parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{sl}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Sl}}' + \mathbf{i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Sl}}''$$
 2-23

Nous pouvons constater d'abord que la partie réelle présente une branche au dessous de laquelle sa valeur est négative $\operatorname{Re}(\varepsilon_{si}(\lambda)) = \varepsilon_{si}^{*} < -1$.

Cette condition est bien remplie pour l'existence de l'onde de surface sur le silicium. En augmentant la concentration N des porteurs de charge, la permittivité $|\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{m}}|$ augmente pour les

grandes fréquences, c'est-à-dire pour les longueurs d'onde vers l'infrarouge proche. Du point de vue effet de cette composante diélectrique, elle contribue à la dispersion optique de l'onde incidente par le matériau impliqué. La différence du silicium par rapport aux métaux alcalins, par exemple l'argent, l'or, ect, est que la partie imaginaire $\mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{m}}^{\prime\prime}$ contribue de façon significative à l'effet de l'absorption optique de l'onde incidente en augmentant la concentration N pour devenir comparable à la partie réelle. Ainsi, les propriétés des plasmons-polaritons excités sur la structure dopée p sont fortement modifiées par l'effet d'absorption selon l'intervalle spectrale d'excitation par champ électromagnétique incident. Dans la suite de ce chapitre, nous allons définir une bande gap,

$$\Delta E = \hbar(\omega_p - \omega_{sp}) \qquad 2-24$$

dans laquelle la nature de l'onde se propageant à travers la structure est contrôlée relativement à la concentration. Cette caractéristique insinuée fait appel à l'étude analytique de la relation de dispersion typique $k_{sp}(\omega)$ dans les différentes conditions de la concentration. Nous soulignons cette hypothèse remplie par le silicium excité dans l'intervalle λ = 1- 20µm, i .e ., que $|\boldsymbol{\varepsilon}'|$ peut être égale et ou supérieur à $\boldsymbol{\varepsilon}''_m$ et l'onde de surface recherchée existe. Dans le cas des métaux alcalins, $|\boldsymbol{\varepsilon}'| \gg \boldsymbol{\varepsilon}''_m$, la génération de l'onde de surface à la résonance plasmon est possible mais non affectée par l'effet d'absorption[Barnes]. Nous évoquons cette différence de l'effet d'absorption sur le profil de la réflexion en champ lointain sur l'Ag et le silicium dopé.



Figure 2-8: Comportement de partie imaginaire de la permittivité du Ag en fonction de la longueur d'onde



Figure 2-9 : Comportement de partie réel de la permittivité du Ag en fonction de la longueur d'onde



Figure 2-10 : Comportement de partie imaginaire de la permittivité du silicium (dopé p) en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentration N des porteurs de charge



Figure 2-11 : Comportement de partie réelle de la permittivité du silicium (dopé p) en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentration N des porteurs de charge

II-7. Conclusion

Les propriétés optiques et les mécanismes fondamentaux d'interactions électroniques des métaux nobles comme l'argent, l'or et le cuivre ou des solides semi-cristallins ont été étudiés en résonance plasmon de surface.

Les propriétés optiques des métaux nobles, décrites par leur constante diélectrique, sont intrinsèquement reliées à celles des électrons et dans une moindre mesure à celles du réseau cristallin. L'or, l'argent et le cuivre sont des métaux nobles constitués d'atomes ayant la même structure électronique : leurs orbitales d sont remplies et ils possèdent chacun un électron sur une orbitale de type s qui, délocalisés dans le réseau cristallin, formeront les électrons de conduction dans le matériau massif. Le réseau cristallin est du type (cfc), cubique à faces centrées.

Les matériaux semi-conducteurs ont des propriétés intermédiaires entre conducteur et isolants. Ils sont caractérisés d'une part, par une bande interdite entre la bande de conduction et la bande de valence et d'autre part, par une conductivité moyenne.

Les propriétés optiques du silicium cristallin ont été revues dans ce chapitre. Plusieurs de ces paramètres sont d'une importance cruciale dans le développement photonique.

Nous constations à travers l'étude comparative entre le silicium et les métaux nobles que le silicium présente l'avantage du dopage lui donnant des possibilités de variations des propriétés optiques et les dimensions du composant photonique. Ce qui argumente notre choix porté sur l'étude la conception du biosensors objet de notre étude.

Chapitre III

Modélisation de la Propagation de la Lumière dans Un BIO Senseur Optique a Semi-Conducteur

III-1 Introduction

Dans cette chapitre, nous présentons une étude théorique de l'infrarouge polaritons de plasmons de surface sur un guide d'onde silicium dopé / gap / silicium dopé .

Les résultats obtenus révèlent que la structure proposée soutient plusieurs polaritons de plasmon de surface dont les résonances angulaire, les positions d'immersion, et toute la largeur à mi-hauteur sont très sensibles à la concentration de porteurs de type n dopé silicium.

Pour les polaritons de plasmons de surface, les caractéristiques de détection de la réflectance mesurée et les profils longitudinaux du facteur de couplage de puissance sont grandement améliorées au moyen d'un matériau de couplage du prisme.

On montre également que la limite de la valeur de concentration de porteurs de silicium contribue à augmenter le facteur de qualité .

Nous avons étudié la configuration de Kretschmann-Raether , pour déterminer les valeurs exactes de Réflectivité des interface de cette structure et l'épaisseur d_m et l'épaisseur d_g pour une utilisation dans le modèle à l'étude de capteur , en soulignant que cet configuration a été utilisé dans de nombreuses études précédentes et constaté que l'intérêt pour l'utilisation de la simple configuration Kretschmann - Raether comme un capteur de résonance plasmonique de surface (SPR) pour sonder en temps réel les interactions de l'interface et de la détection de gaz et de biomatériaux.[2-17]

Cette dernière géométrie se compose d'un film métallique mince ,le permittivité des métaux couramment utilisés pour exciter plasmon de surface polaritons (SPPS) des ondes électromagnétiques evanescent se propageant sur le long d'une interface diélectrique/ métallique et couplés à des oscillations collectives des électrons en argent (Ag), l'aluminium (Al), et l'or (Au) et dans cette étude Si

Nous considérons le cas général de radiations d'ondes interagissent en plan XZ avec un empilement de couches comme le montre la Figure.(3.1) les couches sont homogènes et isotropes avec le plan limites, les propriétés optiques de chaque couche sont caractérisés complètement par deux constante en fonction de longueur d'onde et la concentration de porteurs de charge dans le silicium est caractérisé par son indice de réfraction $n_{Si} = \sqrt{\varepsilon_{Si}}$, tel que la permittivité complexe est donnée par :

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_\infty - \omega_p^2 / [\omega(\omega + i/\tau)]$$
 3-1

avec

$$\omega_p^2 = Ne^2 / (m^* \varepsilon_0) \tag{3-2}$$

$$\tau = m^* / (Ne^2 \rho) \tag{3-3}$$

$$\lambda = 2\pi c/\omega \qquad \qquad 3-4$$

Note :
$$m *= 0.34m_0$$
 (pour le dopage p)

3-5

$$m = 0.27m_0$$
 (pour le dopage n)

où e est la charge de l'électron de masse et m_0 , c la vitesse de la lumière.[64]

[F. Marquier et al. Optics Communications 237 (2004) 379–388]

Et la perméabilité μ_m tel que

$$V_m \times \varepsilon_m^2 \times \mu_m^2 = 1 \tag{3-6}$$

la lumière incidente doit être polarisée TM dans la plan XZ

$$(H_x = H_z = 0 \ et \ E_y = 0)$$

les vecteurs de champ électrique \vec{E} et champ magnétique \vec{B} dans chaque couche sont d'une part perpendiculaires à la direction de propagation Fig.(3-1)



Figure 3-1 :orientations des vecteurs \vec{E} , \vec{B} , $et \vec{K}$ par rapport à la direction de propagation

Pour les valeurs de concentration N et la résistivité p qui est utilisé sont tabulées comme suite :

Tbleau .3-1 : Dépendance de la résistivité. en fonction de la concentration des porteurs de charge du silicium d'après la référence [Handbook]

Concentration N	Résistivité p		
(cm ⁻³)	(Ωcm)		
	type p	type n	
3x 10 ¹⁹	3.5x10 ⁻³	2.5x10 ⁻³	
8x10 ¹⁹	1.5x10 ⁻³	1.0x10 ⁻³	
$2x10^{20}$	6.0x10 ⁻⁴	5.0x10 ⁻⁴	
3x10 ²⁰	4.0x10 ⁻⁴	4.0x10 ⁻⁴	
$4x10^{20}$	3.0x10 ⁻⁴	3.6x10 ⁻⁴	
5x10 ²⁰	2.5x10 ⁻⁴	3.4x10 ⁻⁴	

III-2 Détermination des paramètres de structure dans la configuration de Kretschmann

pour détermination des paramètres de structure dans la configuration de Kretschmann en considérant le matériau dopé p et n est silicium voir a Fig (3-1) et (3-2)

III-2.1 La résonance angulaire sur le profile de la réflectivité d'interface

Pour étudier la réflectivité angulaire de résonance de l'interface doit savoir la fonction diélectrique de Silicium en fonction de fréquence angulaire ω et le module de Droude de Si

✓ Modèle d'indice de réfraction du Si dopé

Le silicium est un milieu absorbant qui se traduit par une fonction diélectrique complexe

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon'_m + i \varepsilon''_m$$
 3-7

La fonction diélectrique est assez bien décrite dans l'intervalle spectrale λ =1-20µm par le model de Droude :

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)}$$
 3-8

avec

$$\varepsilon_m'(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2}$$
 3-9

$$\varepsilon_m''(\omega) = \frac{\omega_{\rm p}^2 \Gamma}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)}$$
 3-10

pour différentes concentrations N selon le type de dopage n.et p

III-3 Calcul Théorique de la réflectivité

Le calcul de la réflectivité de la surface de l'interface est d'une extrême importance de l'étude d'un angulaire de résonance qui va faire l'étude nécessaire et adopter La Géométrie de Kretschmann Figure 3-2

III-3.1 Calcul de la Réflectivité Dans La Géométrie de Kretschmann

Nous considérons une onde électromagnétique incidence .monochromatique . Polarisée transverse magnétique faisant un angle θ_i kretschmann-Raether proposeront la configuration Fig 3-2 avec l'axe z



Fig. 3-2. Schéma d'une seule couche de configuration Kretschmann[74]

L'onde se propage, et subit une réflexion à l'interface (z = d), le reste pénétré dans le Si dope et réfléchie sur l'interface (z = 0) ou une partie est transmise dans le milieu ambiant que un empilement de trois milieux de permittivités respectives $\varepsilon_p \varepsilon_m$ et ε_d

III-3.1.1 Interfaces matériaux- milieu ambiant

Nous allons écrire le champ électrique \vec{E} dans le cas $0 \le z \le d$ (milieu Si dope)

$$\overrightarrow{E_m} = [\overrightarrow{E_{m\iota}} \exp(k_x \cdot x - k_{mz} \cdot z) + \overrightarrow{E_{mr}} \exp(k_x \cdot x + k_{mz} \cdot z)] \exp(\omega t$$
 3-11

Avec

$$\overrightarrow{E_{m\iota}} = E_{mx}(1, 0, k_x/k_{zm}) \text{ et } \overrightarrow{E_{mr}} = r_m E_{mx}(-1, 0, k_x/k_{zm})$$
 3-12

les conditions de continuité de la composante tangentielle de \vec{E} et de la composante normale de \vec{D}

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$
 3-13

<u>- cas (z = d)</u>

 $\overrightarrow{E_p} = \overrightarrow{E_m} \operatorname{et} \overrightarrow{D_p} = \overrightarrow{D_m}$

$$\begin{cases} E_{px}(1-r_p) = E_{mx}(exp(-ik_{zm}.d) - r_m exp(ik_{zm}.d)) \\ \epsilon_P E_{px}(1+r_p)k_{zm} = \epsilon_m E_{mx}(exp(-ik_{zm}.d) + r_m exp(ik_{zm}.d)k_{zm}) \end{cases} 3-14 \end{cases}$$

$$\frac{-\cos(z=0)}{\overrightarrow{E_m} = \overrightarrow{E_d} \operatorname{et} \overrightarrow{D_m} = \overrightarrow{D_d}}$$
3-15

$$\begin{cases} E_{mx}(1-r_m) = E_{dx} \\ \varepsilon_m E_{mx}(1+r_m)k_{zm} = \varepsilon_d E_{dx}k_{zm} \end{cases}$$
 3-16

A partir des équations 3-14 et 3-16 on peut calculer les coefficients de réflexion r_p et r_m

$$r_{p} = \frac{\varepsilon_{m}k_{zp}(1-A) - \varepsilon_{P}k_{zm}(1+A)}{\varepsilon_{m}k_{zp}(1+A) + \varepsilon_{P}k_{zm}(1-A)}$$
3-17

$$r_m = \frac{\varepsilon_d k_{zm} - \varepsilon_m k_{zd}}{\varepsilon_m k_{zm} + \varepsilon_P k_{zd}}$$
3-18

Avec

$$A = r_m \exp\left(2ik_{zm}d\right)$$
 3-19

On fin alors calculer la réflectivité du système difinie par

$$\mathbf{R} = \left| r_p \right|^2 \tag{3-20}$$

III-3.2 Champ électromagnétique d'interfaces d'une structure multicouche :

On considère une structure des trois interfaces la géométrie de structure élaborée Fig3-3 .A partie de même méthodes à détermination des paramètres de structure dans l'étude. Sachent que (les ondes étant planes dans OXZ) et empilement de quatre milieux , de permittivité respectives

ε_p , ε_{m1} , ε_g et , ε_{m2}



Fig. (3.3) Schéma d'une multicouche de configuration Kretschmann-Raether (structure a trois interface)[74]

$$\vec{k} = k_x \vec{\iota} + k_z \vec{k}$$
 3-21

Avec

$$k_{x} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{p}} \sin\theta_{p} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{Si}} \sin\theta_{Si} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{g}} \sin\theta_{g}$$

$$k_{zp} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{p}} \cos\theta$$
3-22

$$k_{zSi} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{Si}} \cos\theta_{Si} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\left(\varepsilon_{Si} - \varepsilon_p \sin^2 \theta\right)}$$
 3-23

$$k_{zg} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_g} \cos\theta_g = \frac{\omega}{c} \sqrt{(\varepsilon_g - \varepsilon_p \sin^2 \theta)}$$
 3-24

III-3.2.1 Calcule des réflectivité d'interfaces d'une structure multicouche \checkmark La couche ($z \ge d$) le prisme

Dans cette milieu le champ électromagnétique $\overrightarrow{E_p}$

$$\overrightarrow{E_p} = \overrightarrow{E_{pi}} + \overrightarrow{E_{pr}}$$
 3-25

$$\overrightarrow{E_p} = [\overrightarrow{E_{pl}}\exp(i(k_x x - k_{zp}(z - d))) + \overrightarrow{E_{pr}} \exp(i(k_x x + k_{zp}(z - d)))] \exp(i\omega t)$$
 3-26

Avec

$$\overrightarrow{E_{pI}} = E_{pX}(1, 0, k_x/k_{zp})$$
3-27

$$\overrightarrow{E_{pr}} = r_p E_{pX}(-1 , 0 , k_x/k_{zp})$$
3-28

✓ La couche ($d_1 \le z \le d$) matériau dopé p ou n

Dans ce milieu le champ électromagnétique $\overrightarrow{E_{S\iota}}$

$$\overrightarrow{E_{Sl}} = [\overrightarrow{E_{Sl}} \exp(i(k_x x - k_{zSl}(z - d_1)) + \overrightarrow{E_{Slr}} \exp(i(k_x x + k_{zSl}(z - d_1)))] \exp(i\omega t)$$
 3-29

Avec

$$\overrightarrow{E_{Sil}} = E_{SiX}(1, 0, k_x/k_{zp})$$
3-30

$$\overline{E_{Sir}} = r_{Si} E_{SiX}(-1, 0, k_x/k_{zp})$$

$$3-31$$

✓ La couche ($0 \le z \le d_1$) gap diélectrique

Dans cette milieu le champ électromagnétique $\overrightarrow{E_g}$

$$\overrightarrow{E_g} = [\overrightarrow{E_{gl}}\exp(i(k_x x - k_{zg}z)) + \overrightarrow{E_{gr}}\exp(i(k_x x + k_{zg}z))]\exp(i\omega t)$$
 3-32

Avec

$$\overrightarrow{E_{gI}} = E_{gX}(1, 0, k_x/k_{zp})$$
3-33

$$\overrightarrow{E_{gr}} = r_g E_{gX}(-1, 0, k_x/k_{zp})$$
3-34

✓ La couche z ≤ 0matériau dopé p ou n

Dans cette milieu le champ électromagnétique $\overrightarrow{E_{Sl}}$

$$\overrightarrow{E_{Sl}} = [\overrightarrow{E_{Sl}} \exp(i(k_x x - k_{zSi} z)) + \overrightarrow{E_{Slr}} \exp(i(k_x x + k_{zSi} z))] \exp(i\omega t)$$
 3-35

Avec

$$\overline{\mathbf{E}_{SiI}} = \mathbf{E}_{SiX}(1,0,\mathbf{k}_{x}/\mathbf{k}_{zp})$$
3-36

$$E_{Sir} = r_{Si}E_{SiX}(-1, 0, k_x/k_{zp})$$
 3-37

III-3.2.2 Calcule des réflectivités d'interfaces

Dans les même conditions de continuité de la composante tangentielle et la composante normale de $\vec{D}(\vec{D} = \varepsilon \vec{E})$

Dans le casd'interface (z = d) prisme /matériau dopé p ou n

$$\overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{p}}}$$
3-38

$$\overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{p}}}$$
 3-39

donc

$$\begin{cases} E_{px}(1 - r_{p}) = E_{Six}(exp(-ik_{zSi}.(d - d_{1}) - r_{Si}exp(ik_{zSI}.(d - d_{1}))) \\ E_{px}\epsilon_{p}k_{zSi}(1 + r_{p}) = E_{Six}\epsilon_{Si}(exp(-ik_{zSi}.(d - d_{1}) + r_{Si}exp(ik_{zSi}.(d - d_{1})))) \end{cases}$$
 3-40

Dans le casd'interface $(z = d_1)$ matériau dopé p ou n/gap diélectrique

$$\overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{g}}} \qquad 3-41$$

et

$$\overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{g}}} \qquad 3-42$$

donc

$$\begin{cases} E_{Six}(1 - r_{Si}) = E_{gx}(exp(-ik_{zg}.d_{1}) - r_{g}exp(ik_{zg}.d_{1})) \\ E_{Six}\varepsilon_{si}k_{zg}(1 + r_{Si}) = E_{gx}\varepsilon_{g}(exp(-ik_{zg}.d) + r_{g}exp(ik_{zg}.d)k_{z}) \end{cases} 3-43$$

Dans le cas d'interface (z = 0) gap diélectrique /matériau dopé p ou n

$$\overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{E}_{\mathrm{g}}}$$
 3-44

et

$$\overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{S1}}} = \overrightarrow{\mathrm{D}_{\mathrm{g}}}$$
 3-45

donc

$$\begin{cases} E_{gx}(1 - r_g) = E_{Six} \\ E_{gx} \varepsilon_g k_{zSi}(1 - r_g) = E_{Six} \varepsilon_{Si} k_{zg} \end{cases}$$
 3-46

A partir des équations (40),(43) et (46) on peut déterminé les expressions de les coefficients de réflexion suivent

$$r_{p} = \frac{\varepsilon_{g} k_{zm}(1+B) - \varepsilon_{m} k_{zg}(1-B)}{\varepsilon_{g} k_{zm}(1+B) + \varepsilon_{m} k_{zg}(1-B)}$$
3-47

$$r_{\rm m} = \frac{\varepsilon_{\rm g} k_{\rm zm}(1+B) - \varepsilon_{\rm m} k_{\rm zg}(1-B)}{\varepsilon_{\rm g} k_{\rm zm}(1+B) + \varepsilon_{\rm m} k_{\rm zg}(1-B)}$$
3-48

$$r_{g} = \frac{\varepsilon_{m}k_{zg} - \varepsilon_{g}k_{zm}}{\varepsilon_{m}k_{zg} + \varepsilon_{g}k_{zm}}$$
 3-49

Avec

$$\mathbf{B} = r_g \exp(2\mathbf{i}k_{zg}d_1) \tag{3-50}$$

La réflectivité de cette configuration définie par :

$$\mathbf{R} = \left| r_p \right|^2 \tag{3-51}$$
III-4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisés une étude de la théorie mathématique pour déterminer la réflectivité de surface des systèmes étudiés à deux milieux et à trois milieux intervenant dans le cas d'une seule couche de configuration Kretschmann figure (3.1) et d'un configuration de multicouche (structure a trois interface) Pour une utilisation les résultats des calculs dans les simulations à effectuer et nous avons introduit pour ces systèmes ce qui suit :

- la structure matériau dopé / Milieu ambiant,
 - la concentration sur la résonance angulaire
 - o L'interface matériau dopé p / Milieu ambiant \mathcal{E}_d
 - o L'interface matériau dopé n / Milieu ambiant,
- la structure multicouche matériau dopé / Milieu ambiant/ matériau dopé
 - o concentration des porteurs de charge
 - o la structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n
 - o la structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p
 - o l'épaisseur de gap sur la résonance angulaire
- Etude angulaire de la résonance des PPS pour $\frac{d_g}{d_s} \approx 1$
 - Etude angulaire de la résonance des PPS pour dopage p
 - o Etude angulaire de la résonance des PPS pour dopage n
- Etude angulaire de la résonance des PPS selon la nature du gap
- Etude Comparative de la résonance des PPS

Les résultats de cette simulation mathématique seront discutés dans le chapitre suivant.

Chapitre IV

Résultats et Discussions

IV-1 Introduction

Après l'avancement du formalisme théorique général pour les deux types de géométries adoptées, nous allons rapporter les résultats de simulation numérique obtenus depuis la mise en œuvre de programmes développés en langage Fortran. L'étude analytique de la résonance des plasmons est restreinte en particulier à l'évaluation des paramètres optimums pour que la réflectivité atteigne un minimum nul ; i.e., production d'un transfert maximal au plasmon via l'onde incidente d'excitation. Une telle étude sur un capteur à base d'un matériau anisotrope a été mené par A. Shalabney, et al [74].

Le champ évanescent produit sur une interface active prisme/métal constitue la propriété caractéristique du phénomène de la résonance plasmon de surface. Il est à noter que la résonance du plasmon est fortement affectée par l'indice de réfraction du diélectrique environnant le métal. La distribution du champ intense dans les couches du capteur SPR, peut être étudié en développant des algorithmes numériques à base de la FDTD ou la méthode matricielle impliquant principalement la résolution des équations de Maxwell et les lois de Fresnel. L'algorithme peut servir à comprendre le comportement de l'écoulement de l'énergie ainsi que le contrôle de l'absorption et la propagation des ondes plasmons de surface générées au niveau de la surface du métal. Un tel algorithme peut être utilisé pour le cas des plasmons longue portée (LR-SPR) par la conception de configurations prévues dans l'avenir.

La sensibilité du capteur SPR dans la configuration Kretschmannest est régie par le rapport entre l'intégralité du champ dans le diélectrique et l'énergie totale du mode de propagation. On peut évaluer la sensibilité du capteur SPR pour différents cas de structures. L'amélioration de la sensibilité par rapport à la longueur d'onde, l'indice de réfraction du prisme et l'épaisseur de la couche diélectrique d'une configuration GW-SPR sera examinée. Notre étude théorique peut aider à l'amélioration et l'optimisation des capteurs SPR basés sur les matériaux dopés. Dans cette perspective d'étude, nous avons considérés les données récapitulées dans la table (4-1).

Dans ce chapitre les discussions concernent les points suivants :

- la structure matériau dopé / Milieu ambiant,
 - Effet de la concentration sur la résonance angulaire
 - o L'interface matériau dopé p / Milieu ambiant Ed
 - L'interface matériau dopé n / Milieu ambiant,
- la structure multicouche matériau dopé / Milieu ambiant/ matériau dopé

- Effet concentration des porteurs de charge
- o la structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n
- o la structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p
- Effet de l'épaisseur de gap sur la résonance angulaire
- Etude angulaire de la résonance des PPS pour $\frac{d_g}{d} \approx 1$
 - Etude angulaire de la résonance desPPS pour dopage p
 - Etude angulaire de la résonance des PPS pour dopage n
- Etude angulaire de la résonance des PPS selon la nature du gap
- Etude comparative de la résonance des PPS
- Etude du facteur de confinement

IV-2 Simulation de la structure matériau dopé / Milieu ambiant,

Pour déterminer la valeur optimale de l'épaisseur de la couche du silicium fiable à l'excitation déterminante des plasmons, on considère le Si dans une configuration monocouche avec un diélectrique que l'on analyse en réflexion totale.

Nous avons calculé la réponse SPR pour différentes concentrations des porteurs de charge pour les deux types de dopage du silicium (n et p) dont les valeurs sont portées dans le tableau 4.1. Nous avons opté le calcul pour la concentration des porteurs de charge est N= $2x10^{20}$ Cm⁻³ et l'épaisseur optimale de la couche du Silicium est d_m= 0.2μ m. Cette épaisseur optimale sera considéré dans tous les cas de simulations que nous allons développer.

	Concentration de	Permittivité de	Permittivité		
Epaisseur de	porteurs de	matériau (n)	de matériau		
couche Si en µm	charge(Cm ⁻³)		(p)		
	N=3x10 ¹⁹	5.91 + i 0.02	7.21 + i1.65		
	$N=8x10^{19}$	-3.50 + i5.39	0.16 + i4.8		
$d_m = 0.2 \mu m$	$N=2x10^{20}$	- 24.08 + i15.86	-17.14 +i10.65		
	$N=3x10^{20}$	- 38.32 + i26.63	- 31.56 +i18.28		
	$N=4x10^{20}$	- 49.08 +i 38.82	- 42.36 +i27.42		
	$N=5x10^{20}$	- 56.49 + i51.42	- 59.48 +		
			i37.45		

Tableau 4-1 valeurs caractéristiques de la permittivité du silicium dopé.

IV-2.1 Effet de la concentration sur la résonance angulaire

IV-2.1.1 L'interface matériau dopé p / Milieu ambiant Ed

Dans la description de l'interaction onde-plasmon pour le contact d'une surface du silicium et le milieu ambiant, il y a la présence d'une chute de la réflectivité à la résonance angulaire relative aux propriétés de l'interface. Cependant, les caractéristiques de cette réponse varie suivant de nombreux facteurs, et en particulier suivant la concentration des porteurs de charge. La figure (4-1) reporte la répartition angulaire de la SPR sous l'effet de la concentration des porteurs de charge.



Fig .4.1. Simulation numérique du comportement de la réflectivité sur la couches (silicium dopé p) pour différents concentrations des porteurs de charges. Les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m \ \lambda = 8.03 \ \mu m \ \epsilon_p = 2.1 \ n_g = 1.0$.

Selon les résultats de la figure 4.1, nous constatons que chaque fois que la concentration de porteurs de charges augmente les valeurs de l'angle de résonance θ_{SPR} se déplacent vers les valeurs inférieures tandis que les valeurs de la réflectivité augmentent comme l'indique le tableau (4.2).

concentrations de porteurs	θSPR°	La Réflectivité d'interface
de charges Cm-3		Si(p)-diélectrique
2x1020	47.81	0.00
3x1020	45.43	0.093
4x1020	45.19	0.259
5x1020	44.67	0.43

Tableau 4-2 valeurs de l'angle de résonance θ_{SPR} et de la réflectivité d'interface Si(p)-diélectrique obtenues par simulation numérique.

Ces résultats montrent que pour la concentration $N=2x10^{20}$ cm⁻³, la réflectivité est optimale. Cette condition sera considérée dans toute la suite de l'étude.

IV-2.1.2 L'interface matériau dopé (n) / *Milieu ambiant* (n_d)

Dans le cas du silicium dopé n, pour les mêmes conditions de simulation en faisant varier la concentration, nous avons obtenu un décalage de l'angle θ_{SPR} et un taux minimum variable de réflectivité comme le montre le tableau (4.3).



Fig .4.2. Simulation numérique du comportement du spectre de la réflectivité sur une couches du silicium (dopé n) pour différentes concentrations de porteurs de charges. Les paramètres de simulation considérés : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$, $\epsilon_p=2.1$, $n_g=1,0$.

Comme le montre la figure (4.2), nous constatons qu'une augmentation de la concentration des porteurs de charge décale la résonance du plasmon vers de faibles angles avec une atténuation du taux de transfert d'énergie. En fait, ces pertes atténuées sont mesurables sur le minimum du pic de la SPR et sont consommées par effet Joule par le métal. Une comparaison de ce comportement pour le Si dopé p est reportée dans le tableau 4.3.

concentrations de porteurs de charges Cm ⁻³	θ_{SPR}°	La Réflectivité d'interface Si(p)-diélectrique
$2x10^{20}$	46.32	0.038
3x10 ²⁰	45.04	0.22
$4x10^{20}$	44.62	0.392
5x10 ²⁰	44.62	0.499

. **Tableau 4-3 :** valeurs de l'angle de résonance θ_{SPR} et de la réflectivité d'interface Si(n)-diélectrique obtenu par simulation numérique

Ces résultats montrent que pour des valeurs de la concentrations $N=2x10^{20}$ cm⁻³, nous avons un transfert d'énergie maximum vers le plasmon. Le plasmon étant excité à la position angulaire, de 46.32° le taux de la réflectivité est de l'ordre de 3.8%. En faisant une comparaison systématique pour le cas du Si dopé p, l'optimisation du transfert énergétique est meilleure.

IV-3 Simulation de la structure multicouche

Dans ce cas, nous incluons l'effet d'un gap et du prisme pour analyser les caractéristiques du spectre angulaire. Soit la configuration : Si dopé / Milieu ambiant/ Si dopé (Cf. Fig 4.3). Pour une telle structure géométrie du type MIM, l'analyse reposera sur les effets de la concentration des porteurs de charges, de l'épaisseur et la nature du gap, impliquées sur la réflectivité.

IV-3.1 Effet de la concentration des porteurs de charge

IV-3.1.1 La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n



Figure (4.3): Comportement de la réflectivité angulaire pour différentes concentrations des porteurs de charge pour le Si dopé n. Les paramètres de simulation sont: N= $2x10^{20}$, $3x10^{20}$, $4x10^{20}$, $5x10^{20}$ cm⁻³, d_g =8.05 µm, d_{Si}=0.2 µm, $\varepsilon_p = 2.1$, $n_g = 1,0$.

$\theta_{\rm SPR}^{\circ}$	La Réflectivité de la structure
	Si(n)-diélectrique-Si(n)
46.74	0.050
42.07	0.171
17	0.19

Tableau 4-4. Valeurs caractéristiques de la réflectivité sur la structure Si(n)-diélectrique-Si(n).

IV-3.1.2 La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p



Figure (4-4) : Comportement de la réflectivité angulaire pour différentes concentrations des porteurs de charge pour le cas du Silicium dopé p. Les paramètres de simulation sont: $N=2x10^{20}$, $3x10^{20}$, $4x10^{20}$, $5x10^{20}$ cm⁻³, d_g =8.05 µm, d_m=0.2 µm, $\varepsilon_p = 2.1$, et $n_q = 1,0$.

θ_{SPR}°	La Réflectivité de la structure Si(p)-diélectrique-Si(p)
48.0	0.0
43	0.07
18	0.05

Tableau (4-5). valeurs caractéristiques de la réflectivité pour la structure Si(p)-diélectrique-Si(p).

Les résultats obtenus montrent clairement que la que la structure MIM supportent des plasmons tri-modes (trois pics) sous l'effet de la concentration des porteurs de charge. Toute fois, une comparaison faite pour le cas de la structure MIM avec le Si dopé n, le transfert énergétique est optimum pour n. Pour la concentration N= $2x10^{20}$ cm⁻³, les spectres des modes sont montrées sur les figures (4.3) et (4.4) et les valeurs caractéristiques respectives sont récapitulées dans le tableau (4.4) et (4.5).

Pour montrer les effets de la concentration des porteurs de charge pour l'arrangement Si(n)/gap/Si(n), les spectres de la réflectivité sont reportés sur les Figs (4-3) et (4-4), où les largeurs du Si et celle du gap (considéré comme le milieux ambiant) sont fixées à 0,2 μ m et 8,05 μ m, respectivement. Ici, il est observé qu'un transfert énergétique optimale de 5 % (pour l'angle de résonance, $\theta_{SPR} \approx 47,5^{\circ}$) pour le Si dopé n et 0 % et pour l'angle supérieur,

 $\theta_{SPR} \approx 47,5^{\circ}$) pour le Si dopé p. La lumière incidente est fortement couplée aux modes SPPs pour une concentration de porteurs de charge, N = 2 × 10²⁰ cm ⁻³. L'effet de la concentration des porteurs de charge N sur la résonance mesurée sur la réflectivité est similaire à celui induit par la première couche active d_{m1} de la structure. Cependant, en augmentant la concentration N, la position angulaire de chaque mode excité résonance se décale vers les faibles angles avec élargissement à mi-hauteur et les minimas augmentent. Pour le cas du Si dopé p le mode SPR est excité à 18 ° et pour le Si dopé n le mode SPR est localisé à 17 °. Pour une concentration N = 2 × 10²⁰ cm ⁻³, la largeur à mi-hauteur (FWHM) mesurée à $\theta_{SPR/2}$ est estimée à ~ 13,29. Cela conduit à estimer le facteur de qualité de l'ordre de 1,5 . Enfin, pour illustrer le comportement des caractéristiques de détection (le minimum des pics et la concentration SPR) des modes plasmons que supportent la configuration MIM, l'influence de la concentration de porteurs de charge est clairement démontrée sur les Figs(4-3) et (4-4). L'angle de résonance du premier mode , par exemple, reste constant en variant la concentration N dans l'intervalle 2 × 10²⁰ -5 × 10²⁰ cm ⁻³, mais le minimum du creux de la SPR correspondant augmente dans un ajustement polynomial.

IV-3.2 Effet d'épaisseur de couche du matériau

IV-3.2.1 La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n



Fugue (4-5). Comportement de la réflectivité angulaire sous l'effet de l'épaisseur du gap disposé entre deux les couches du Si dopée n. La concentration des porteurs est fixée à N = $2x10^{20}$ cm⁻³, soit d_g = 0.05-8.05 µm, λ = 8.03 µm, ε_p = 2.1, n_g = 1,0.

IV-3.2.2 La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p



Fugue (4-6). Comportement du spectre de réflectivité angulaire sous l'effet de l'épaisseur du Si dopée p, $d_{Si} = 0.05$ -8.05 µm. La concentration est fixée à N =2x10²⁰ cm⁻³ et d_g =8.05 µm, λ =8.03 µm $\varepsilon_p = 2.1$, $n_g = 1,0$

Dans cette étude, on adopte un gap d'indice réel $n_g = 1, 0$. Pour le contrôle du confinement et de la propagation des modes plasmons dans toute structure, l'épaisseur, d_{m1} de la première couche active disposée avec le coupleur optique joue un rôle crucial dans le transfert énergétique de la lumière incidente vers un mode SPR . Pour souligner ce dernier effet , la réponse SPR en fonction de l'angle incidence est représentée sur à la Fig (4-5). Un transfert énergétique optimale vers la SPR est réalisé lorsque l'épaisseur, dm1 est ajustée dans l'intervalle 0.08 -0.1 µm. Dans ces conditions, trois modes de résonance avec différents facteurs de qualité ($Q = \lambda / \Delta \lambda$) sont nettement résolus sur le spectre où le minimum du pic SPR atteint 0%. Pour des valeurs plus élevées de d_{m1}, la réflectivité prédit l'excitation de trois modes SPR distincts où l'intensité du creux atteint 60% pour la structure multicouche Si dopé n et 45% pour la structure multicouche Si dopé p. Cette comparaison systématique est portée sur la Fig(4-6). Cette propriété est prévisible parce que pour un matériau plus épais, une grande partie de l'énergie incidente est perdu par des réflexions multiples. En d'autres termes, l'excitation de la SPR est due à l'atténuation de l'onde évanescente diffractée à l'interface avec le Si. En outre, la sensibilité de la structure MIM par rapport à l'épaisseur d_{m1}, est apparente.

IV-3.3 Effet de l'épaisseur de gap sur la résonance angulaire

Nous considérons cette fois-ci l'effet impliqué sur la SPR par la variation de la largeur du gap. Il s'en suit ainsi la détermination de la valeur optimale de l'épaisseur de gap conduisant à simuler la configuration à capturer la SPR dans une forte résolution optique. Nous avons exploité le calcul analytique en fixant des conditions sur la concentration des porteurs de charge pour le Si dopé n et p. L'ordre de grandeur de la concentration considérée, les propriétés optiques du Si (dopé n et p) sont reportées dans le tableau (4.6). La concentration des porteurs de charge est N= $2x10^{20}$ cm⁻³ et l'épaisseur optimale de la couche du Si est d_m = 0.2μ m.

Epaisseur de gap en µm	0.25	0.3	0.35	0.40	0.45	0.475	
Permittivité de Si (n)	-24 .08 + i 15.86			-			
Permittivité de Si (p)		-17.14+ i 10.65					
Concentration de porteurs de charge en Cm ⁻³		$2x10^{20}$					
Epaisseur de Si en µm		0.2					

Tableau (4-6) Tableau récapitulatif des données de simulation pour une concentration des porteurs de charge.

IV-3.3.1 La structure multicouche matériau dopé p/gap/matériau dopé p



Fig. 4-7. Le comportement de la réflectivité sur la couche du silicium dopé p pour différentes largeurs d_g du gap. Les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m\epsilon_p=2.1$, $n_g=1,0$ et $\epsilon_m = -17.14 + i \ 10.65$

IV-3.3.2 La structure multicouche matériau dopé n/gap/matériau dopé n



Fig. 4-8. Le comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé n) pour différentes largeurs d_g du gap. Les paramètres de simulation sont: ($d_m = 0.2 \ \mu m$, $\lambda = 8.030 \ \mu m \epsilon_p = 2.1 n_g = (1,0)$ et $\varepsilon_m = -24.08 + i15.86$)

IV-3.3.3 La structure multicouche matériau dopé p/gap/ matériau dopé n



Fig. 4 -9 Le comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé n et p) pour différents largeurs d_g du gap les paramètres de simulation sont : d_m =0.2 µm , λ =8.03 µm, n_g =(1,0), $\varepsilon_{m1}(p) = -17.14 + i10.63$, ε_{m2} (n) = -24.08 + i15.86

IV-3.3.4 La structure multicouche matériau n/gap/matériau dopé p



Fig. 4 -10 Le comportement de couche mines (silicium dopé n et p) pour différents largues d_g du gap les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$, $n_g=(1,0)$, $\epsilon_{m1}(n) = -24.08 + i15.86$, $\epsilon_{m2}(p) = -17.14 + i10.65$

IV-3.4 Etude angulaire de la résonance des PPS pour $\frac{d_g}{\lambda} \approx 1$

Pour différentes largeurs d_g du gap tel que $\frac{d_g}{\lambda} \approx 1$, nous allons déterminer la valeur de l'épaisseur du gap pour laquelle le capteur enregistre une détection de la SPR avec une résolution optique maximale. Nous considérons plusieurs conditions de simulations sur la concentration des porteurs de charge pour le silicium dopé n et p. Les concentrations adoptées sont portées dans le tableau 4.7. L'épaisseur optimale de la couche active du Silicium est d_m = 0.2µm.

Si dopé n	$4x10^{20}$ Cm ⁻³	$\varepsilon_{\rm m} = -49 + i 38.82$				
	5x10 ²⁰ Cm ⁻³	εm	= -56.4	9 +i 51	.42	
Si dopé p	$4x10^{20}$ Cm ⁻³	$\varepsilon_{m} = -42.36 + i 27.42$				
	5x10 ²⁰ Cm ⁻³	$\epsilon_{\rm m} = -59.48 + i37.45$				
l'épaisseur de gap µm	6.5	7	8	8.02	8.05	

Tableau 4-7. Les paramètres caractéristiques de la structure impliqués dans la simulation du profil angulaire de la SPR.





Fig4-11 Le comportement de la réflectivité sur la couche silicium p/ Gap)/Si(p) pour différentes largeurs du gap $d_{g=6500}$, 7000, 7500, 8020 et 8050nm. Les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2$ μm , $\lambda=8.03 \ \mu m \ n_g =(1,0)$, $\epsilon_m = -42.36 + i27.42$, $\epsilon_p =2.1$.



Fig 4-12 Le comportement de la réflectivité sur la couche silicium p/ Gap)/Si (p) pour différentes largeurs du gap d_g =6500, 7000, 7500, 8020 et 8050nm. Les paramètres de simulation sont : d_m =0.2 μ m, λ =8.03 μ m, n_g =(1,0), ϵ_m =- 59.48 + i 37.4, ϵ_p =2.1

IV-3.4.2 Etude angulaire de la résonance PPS pour le dopage n du Si

En considérant une concentration fixée sur les porteurs de charge, le comportement de la réflectivité est reporté sur la figure 4-13 pour différentes valeurs du gap. Pour cette étude, nous rappelons les données de la structure qui sont récapitulées selon le tableau 4.7.

 $N = 4x10^{20} \text{ cm}^{-3}$



Fig.4-13. Le comportement de la réflectivité sur la couche silicium n/ Gap) pour différentes largeurs du gap $d_{g=6.5\mu m}$, 7 µm, 7.5 µm, 8.02 µm et 8.05 µm. (les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \mu m$, $\lambda=8.03 \mu m$, $n_g =(1,0)$, $\epsilon_m(n) = -49 + i38.82$, $\epsilon_p = 2.1$)

 $N = 5x10^{20} \text{ cm}^{-3}$



Fig. 4-14. Le comportement de la réflectivité sur la couche silicium n/ Gap pour différentes largeurs du gap $d_g = 6.5$, 7, 7.5, 8.02 et 8.05µm les paramètres de simulation sont : $d_m=0.2 \mu m$, $\lambda=8.03 \mu m$, $n_g=(1,0), \epsilon_m(p) = -59.48 + i 37.45$, $\epsilon_p = 2.1$.

Dans les conditions appropriées résumées dans le tableau 4.7 tels que l'épaisseur et l'indice de réfraction du métal, l'onde plasmon de surface excitée à une résonance angulaire, θ_{SPR} (voir figures. (4-10), (4-11), (4-12), (4-13), et 4-14)) absorbe partiellement une énergie depuis le rayonnement incident et admet une grande sensibilité avec l'indice de réfraction de l'interface diélectrique adjacente avec la couche du métal. Cette dernière propriété remarquable a attiré l'attention pour développer des applications photoniques, i.e., capteurs SPR pour analyser des effets de surface, à base des nanostructures. Dans cette contribution, nous décrivons la performance de la structure typique MIM : silicium dopé -diélectrique -silicium dopé en terme de confinement et manipulation des modes plasmons de surface couplés par champ à effet tunnel à travers un espace diélectrique. Avec une approche analytique, notre multicouche fonctionnelle a le potentiel de piéger des modes multiples des plasmons de surface (MSP) qui se traduisent par des chutes de la réflectivité contrôlée sur la concentration des porteurs de charge N et la largeur dg du gap diélectrique. Comme nous sommes intéressés à inclure l'effet de la contribution de la concentration de porteurs de charge, nous prenons la permittivité $\varepsilon_{si}(\omega, N)$ du silicium en dépendance avec la fréquence de l'onde incidente. Une telle dépendance est exprimée par le modèle de Drude. Avec une longueur d'onde, λ dans l'intervalle (1-20µm) d'une lumière polarisée et à une épaisseur du silicium dopé fixée, dsi = $0.2\mu m < \lambda$ (régime sub-longueur d'onde), nous obtenons trois modes résolus sur le profil de la réflectivité. En avant ajusté la largeur, $dg = 8.05 \mu m$, ces modes sont prononcés aux angles 14,02 °, 40,37 ° et 45,9 °. D'autre part, les longueurs d'onde des plasmons de surface (PS) piégées dans la structure guide d'onde MIM sont 22,8, 8,55 et 7.71µm respectivement. Toutefois, afin de souligner les principales caractéristiques du capteur proposé, nous rapportons la réponse des plasmons de surface mesuré au moyen de la configuration classique monocouche, i.e., interface silicium-diélectrique dopé. La contradiction apparente entre les deux configurations révèle que la lumière peut être stockée à travers des nanostructures qui promettent des applications en bio-détection avec une sensibilité améliorée ; puisque la largeur de la réflectivité SPR devient plus étroite avec l'augmentation de la largeur du gap.

IV-3.5 Etude angulaire de la RPP selon la nature du gap

On considère dans ce cas un gap diélectrique réel dont l'indice de réfraction prend les valeurs : $n_g = 1, 1.5, 2.5$ et 3.





Fig.4-15. Le comportement de la réflectivité sur la couche active (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5, 2.5$ et 3. Les paramètres de simulation sont : $d_m=200$ nm , $\lambda=8.030 \ \mu\text{m}$, $\epsilon_p=2.1$, et $\epsilon_m=-17.14 + i \ 10.63$.

IV-3.5.2 La structeur Si(n) -gap-Si(n)



Fig.4-16. L comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé n) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5, \text{ et } 3$. Les paramètres de simulation sont : $d_m=200 \text{ nm} d_g=450 \text{ nm}$, $\lambda=8.030 \mu \text{m} \epsilon_p=2.1$, et $\epsilon_m = -24.08 + i 15.86$.

IV-3.5.3 La structure Si(p) -gap-Si(n)

Dans un arrangement du Si dopé p et le Si dopé n et où le gap est disposé entre ces deux couches, nous analysons une autre fois l'effet de l'indice du gap sur les caractéristiques de la résonance des plasmons supportés par la structure. Soit les deux dispositions possibles suivantes :



Fig.4-17. Le comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. les paramètres de simulation sont : $d_m = 0.2 \ \mu m$ $d_g = 0.45 \ \mu m \ \lambda = 8.03 \ \mu m \ \epsilon_p = 2.1$, et $\epsilon_{m1}(p) = -17.14 + i \ 10.63$, $\epsilon_{m2}(n) = -24.08 + i \ 15.86$

IV-3.5.4 La structure Si(n) -gap-Si(p)



Fig.18. Comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé p) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5, \text{ et } 3$. les paramètres de simulation sont $d_m=200 \text{ nm} d_g=450 \text{ nm}$, $\lambda=8.030 \text{ }\mu\text{m} \quad \epsilon_p=2.1$, et, $\epsilon_{m1}(n) = -24.08 + i 15.86$, $\epsilon_{m2}(p) = -17.14 + i 10.63$.

IV-3.5.5 La structure Si(n) -gap-Si(n) pour $\frac{d_g}{\lambda} \approx 1$

Analysons l'effet de l'épaisseur du gap pour différente concentration des porteurs de charge sur le profil angulaire de la structure dans cette nouvelle condition.

- Pour la concentration $N=4x10^{20}$ Cm⁻³



Fig.4.19. Le comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé n) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1$, 1.5, et 3. Les paramètres de simulation sont: $d_m = 200$ nm $d_g = 7000$ nm $\lambda = 8030$ nm $\epsilon_p = 2.1$, et, $\epsilon_{m1}(n) = -49 + i$ 38.82.

IV-3.5.6 La structure Si(p) -gap-Si(p) - Pour la concentration $N=4x10^{20}$ Cm⁻³



Fig.4.20. Simulations numérique de la comportement de couche minces (silicium dopé n) selon la nature du gap ayant l'indice réel $n_g = 1, 1.5, et 3$. les paramètres de simulation sont $d_m=200$ nm $d_g=7000$ nm, $\lambda=8030$ nm $\epsilon_p=2.1$, et, ϵ_m (p) = -42.36 + i 27.42,

IV-3.6 Etude comparative de la résonance angulaire de PPS

IV-3.6.1 La comparaison en terme de géométrie d'excitation

Les caractéristiques de la résonance angulaire dépendent fortement de la géométrie adoptée ainsi que des paramètres des différents milieux qui la composent. Pour démontrer et prédire ces différences, faisons une analyse des profils de SPR et du facteurs de cnfinement longitudinal obtenus dans les géométries MIM suggérée et la structure monocouche : prisme / Si dopée n / l'air ambiant. Pour ce faire, nous adoptons une épaisseur optimale $dm_1 = 0,2 \mu m$ pour laquelle la structure piège un mode plasmon dont la largeur du pic est plus étroite. Dans cette condition, le traitement théorique révèle qu'un mode SPR est soutenue à l'angle d'incidence θ_{SPR} = 45 °, où le minimum de la réflectivité est 25,5 % (Cf. Fig. 4.21-22, ligne en rouge). Ainsi, avec une concentration de porteurs fixée $N = 4 \times 10^{20}$ cm⁻³, les profondeurs de pénétration des PPS de part et d'autre de l'interface Si ($\varepsilon_{Si} = -49,0 + i38.82$)/air $\varepsilon_d = 1$ sont : 9,5 µm (dans le diélectrique) et 0,2 µm (dans le Si). A partir de cette analyse quantitative, il est clair que le plasmon reste plus confiné dans le milieu conducteur (Si) que dans le diélectrique. Les caractéristiques de détection de la géométrie Kretschmann-Raether, nous rapportons la réflectivité calculée (Cf. Fig4.21-22, courbe noire) prédite sur un prisme/ Si dopé n / gap / Si dopé(n), où la largeur dg est fixée à 8,05 µm. Dans les mêmes conditions en termes de la longueur d'onde , $\lambda = 8,03 \mu m$, et la concentration , N , le capteur MIM proposé présente un avantage de supporter trois modes PS résolus sur le profil de la réflectivité en choisissant la largeur, dg de l'ordre de λ . A partir de cette étude comparative, on peut conclure que le premier mode de la SPR correspond à la position angulaire $45,7^{\circ}$ dont la réflectivité atteint un minimum de 29,5 %. En outre, les longueurs d'onde des modes SP piégés dans le multicouche s'évaluent à 22.6 µm, 8.55 µm et 7,71 µm. Toutefois, dans le cas de la SPR excité dans la géométrie Kretschmann, en dehors de la résonance, la réflectivité n'atteint pas l'unité. La raison de cet effet est que la structure présente des pertes radiatives.



Figure4-21 Calcul des spectres de réflectivités angulaires avec le capteur classique de SPR (ligne rouge) et la structure MIM dopé (ligne noire). La longueur d'onde d'excitation est de 8,03 µm.



Fig 4-22. Simulation numérique du comportement de la réflectivité sur la couche (silicium dopé n) pour l'indice du gap réel $n_g = (1.5, 0)$ et pour deux concentrations des porteurs de charges. Les paramètres de simulation sont : $d_m = 200$ nm $d_g = 7000$ nm, $\lambda = 8.030 \mu$ m, $\epsilon_p = 2.1$, tel que pour $4x10^{22}$ cm⁻³ $\epsilon_{m1}(n) = -49 + i 38.82$ et pour $5x10^{22}$ cm⁻³ on a $\epsilon_{m1}(n) = -56.49 + i 51.42$.



Fig4.23 Comparaison entre les comportements de la réflectivité sur la couche (silicium dopé p) pour l'indice de gap réel $n_g = (1.5, 0)$ et pour deux concentrations des porteurs de charges. Le paramètre de simulation sont: $d_m=0.2 \ \mu m$, $d_g=7 \ \mu m$, $\lambda=8.03 \ \mu m$ $\epsilon_p=2.1$, $\epsilon_{m1}(n)=-42.36 + i \ 27.42$ et $\epsilon_{m1}(n)=-59.48 + i \ 37.45$

IV-3.7 Facteur de confinement

Dans la partie ci-dessus, nous avons démontré la capacité de la structure MIM pour stocker trois modes de résonance mesurées sur le facteur de réflexion et dont les caractéristiques de détection sont significativement affectées par la concentration et l'épaisseur du conducteur.

Les résonances réparties sur la réflectivité angulaire s'explique par conséquent en raison de la présence du processus de couplage entre les deux interfaces de la structure MIM. Autrement dit, à chaque interface est associé un mode plasmon pour voir un phénomène de recouvrement par des réflexions multiples. Dans l'intérêt de montrer les effets de la largeur, dg du gap isolant, et de la concentration N des porteurs de charge sur le confinement longitudinal, nous présentons les résultats sur les figures . 6 , 7, 8 et cela pour différentes conditions. Les résultats montrent que les modes de couplage sont caractérisés par une distribution de champ électromagnétique autour d'une résonance (pic aigu) pour une faible concentration des porteurs de 2 x 10^{20} cm⁻³, lorsque dg et d_{m1} sont ajustées dans l'ordre du régime sub-longueur d'onde (dg $\ll \lambda$). Ce facteur de confinement peut être optimisé sur la largeur dg = 0,6 µm, les autres paramètres sont reportés sur la figure 4.25. Dans ce régime particulier, le pic aigu localisé à l'angle de 45,25 ° (Cf. Fig.4-25) correspond à l'effet de superposition entre les deux modes SPP identiques sur chacune des deux interfaces. Dans le

cas dg $\geq \lambda$ (Cf. fig 4-29), la largeur du pic s'élargie, et l'efficacité couplage lumière –SPP diminue. En conséquence, une paire de modes couplés est prononcée. Cependant, pour une concentration $N \geq 4 \times 10^{20}$ cm⁻³ des porteurs de charge, le facteur de confinement est affaibli en raison de l'augmentation de la partie imaginaire de la permittivité du Si (Cf. tableau 1). Ainsi, du point de vue applications potentielles, le premier mode excité dans la géométrie multicouche de MIM est de grand intérêt, du fait qu'on obtient une résolution optique améliorée voir le facteur de qualité, Q, et un fort facteur de confinement.

IV-3.7.1 L'effet de l'épaisseur du gap

Nous optons dans ce calcul numérique la condition $dg \ll \lambda$ pour voir le comportement du confinement longitudinal sur la structure MIM.



Fig.4-24. Comportement du facteur de confinement longitudinal dans le régime su-longueur d'onde en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé n pour différentes valeur de dg.



Fig.4-25. Comportement du facteur de confinement longitudinal dans le régime sub-longueur d'onde en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé p avec différentes valeurs de dg

Examinons l'étude pour le cas $d_g \approx \lambda$:



Fig.4.26. Comportement du facteur de confinement longitudinal dans le régime longueur d'onde en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé p avec de différentes valeurs de dg



Fig.4.28. Comportement du facteur de confinement longitudinal dans le régime de sub-longueur d'onde en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur Si dopé n pour différentes valeurs de dg

- Pour $d_g > \lambda$







Fig4.30 Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé p pour différentes valeurs du gap dg > λ , avec N = 2 × 10²⁰ cm⁻³.

IV-3.7.2 L'effet de la concentration des porteurs de charge

-Pour $d_g \approx \lambda$



Fig 4.31: Comortement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé n pour différentes concentrations des porteurs, 2, 3, 4, et 5 x 10^{20} cm⁻³.



Fig4.32 : Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé p pour différentes concentrations ,2 , 3, 4 , et 5 x 10²⁰ cm⁻³.

- Pour $d_g \ll \lambda$



Fig4.33: Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé p pour différentes concentrations,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.



Fig4.34: Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé n pour différentes concentrations ,2 , 3, 4 , et 5 x 10²⁰ cm⁻³.

- Pour $d_g > \lambda$



Fig4.35: Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé n avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.



Fig4.36: Comportement du facteur de confinement longitudinal en fonction de l'angle d'incidence pour un capteur de Si dopé p avec différentes concentrations de porteurs ,2 , 3, 4 , et 5 x 10^{20} cm⁻³.

IV-4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude de la résonance plasmon de surface manipulée sur deux types de configuration Kretschmann et multicouche à base du Si dopé n et p. Ces configurations sont explorées en réflexion totale par l'emploi d'un prisme optique. Nous nous sommes intéressés dans un premier temps à l'optimisation de la couche active du Si (dopé n et p) depuis la configuration Kretschmann permettant la localisation d'un pic de résonance étroit et d'une forte amplification du champ (rapport de confinement) à l'interface. Les résultats analytiques ont montré que la sélectivité angulaire du pic de résonance et l'amplification de la distribution du champ s'accroissent dans un ordre limite de la concentration des porteurs de charge. Dans une étape suite, un accent a été mis sur l'étude de la résonance SPR sous l'influence de la nature optique du gap et de la concentration des porteurs.

Enfin, nous avons montré que des conditions optimales sur les caractéristiques de la résonance plasmon et de l'amplification du champ sont atteintes justifiant en particulier le potentiel de la structure multicouche élaborée à base du Si dopé n pour être adaptée à la biodetection des effets de surface.

VI. Conclusion Générale

L'objectif principal du travail porté dans ce manuscrit consistait à l'élaboration d'une structure multicouche et démontrer son potentiel à contrôler le guidage et le confinement des modes couplés engendrés à travers un gap diélectrique réel. Cependant, la performance de la structure élaborée se décrit sur l'influence des paramètres de ce gap (indice et épaisseur) qui est considéré comme étant le milieu à détecter ainsi que ceux de son environnement. En s'appuyant sur l'approche théorique basée sur les équations de Maxwell, les champs électromagnétiques et les propriétés de continuité aux interfaces, cette technique optique d'analyse offre la manipulation du transfert de l'énergie d'une onde électromagnétique vers des modes résonnants le long d'une interface métal-diélectrique, et ce en microstructurant les paramètres géométriques. Dans le sens physique, ce transfert, dépendant fortement des propriétés de l'interface (les indices de réfraction de part et d'autre, et pertes), se manifeste comme un phénomène d'absorption et se marque par une décroissance de l'intensité réfléchie mesurée selon le mode d'interrogation angulaire ou spectrale. Ce transfert énergétique dépend en conséquence des longueurs d'atténuation de ces modes dans la direction perpendiculaire de l'interface. Pour ce faire, dans une première étape, nous avons fait notre choix sur le silicium dopé n, considéré comme un matériau plasmonique actif et dont l'effet attendu sur les modes guidés était l'influence de la contribution des porteurs de charge prise dans l'intervalle $3x10^{19}$ cm⁻³- $5x10^{20}$ cm⁻³ pour rappeler que ces ordres de concentrations sont atteignables en pratique. Notons que la raison de ce choix revient au fait que les propriétés optiques du silicium, excité par une radiation de longueur d'onde λ dans l'intervalle, 1-20µm, présente un comportement métallique similaire à celui des métaux nobles couramment utilisés pour le même propos. Autrement dit, selon le type de dopage (n ou p), un tel choix offre l'avantage d'impliquer la concentration en porteurs de charges sur le domaine d'existence des plasmons qui n'est pas le même. En fait, ces dernières hypothèses adoptées sont représentatives à des défauts pour voir leurs influences sur la modification des caractéristiques (profil, résonance angulaire, largeur à mi-hauteur, et taux de confinement) des modes de structure et ses fonctionnalités. Les résultats dans de telles conditions sont prédits avec d'autres limites comparés à ceux de la configuration standard de Kretschmann. A noter que cette dernière a vu une large utilisation en pratique pour étudier les interactions moléculaires mais elle reste limiter en termes de profile, de l'intensité de distribution des champs et les propriétés de dispersion.

Pour dégager la sensibilité des modes guidés le long d'une interface, la technique de couplage d'une onde d'excitation aux électrons libres de conduction est celle de la réflexion totale atténuée (ATR) assurée par un prisme optique de fort indice de réfraction. La réponse optique de l'interface est étudiée en mode angulaire, i.e. la réponse optique est analysée à angle d'incidence variable pour une longueur d'onde fixée ainsi que tous les paramètres de la géométrie ; constantes diélectriques et épaisseurs. Une telle technique a potentiellement fait ses preuves pour être adaptée à la caractérisation des matériaux en couches minces et au diagnostic des effets de surface. En termes de sensibilité de toute structure plasmonique à la variation d'indice et à l'ordre de grandeur des épaisseurs du milieu de détection (en contact avec le matériau conducteur), la problématique repose plus particulièrement sur les caractéristiques de la forme du profile des modes résonnants, et le taux énergétique associé. C'est cette question qui a fait l'axe de notre étude pour démontrer qu'une structure en cavité est déterminante pour le contrôle du confinement des modes plasmons et la durée de vie du photon (facteur de qualité). Les paramètres de structure étant optimisés, la cavité à base du silicium dopé constitue un système photonique fiable pour le piégeage de la résonance plasmon de surface (SPR) dont les caractéristiques justifient l'application de telle structure multicouche comme un dispositif de détection flexible en pratique dans sa manipulation.

L'interprétation des réponses du capteur se base sur le calcul analytique où nous avons simulé le silicium par un modèle d'indice dépendant du dopage. En faisant appel à des méthodes numériques, de nombreux travaux actuels visant diverse applications ont fait l'objet de suggérer des dispositifs destinés à l'imagerie des plasmons de surface et ces résultats de littérature s'alignent avec les notre. En fin, une autre dimension en perspective sur le sujet des structures photoniques est prometteuse en considérant cette fois des nanoparticules du Si où la problématique sera destinée à l'étude des effets non linéaires; effet SERS : Surface-enhanced Raman scattering (à titre d'exemple). C'est l'étude des plasmons localisés récemment lancée sur les nanoparticules métalliques tels que Au, Ag offrant la mise en jeu les interactions moléculaires par exaltation du champ électromagnétique d'interface.

References

- M. Zayats and all, Probing photoelectrochemical processes in Au-CdS nanoparticle arrays by surface Plasmon resonance: application for detection of acetylcholine esterase inhibitors, Journal of American Chemical Society 125 (2003) 16006-16014.
- [2] J. Homola, Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species, Chemical reviews 108 (2008) 462-493.
- [3] Fano, U. J. Opt. Soc. Am. (1941), 31, 231.
- [4] R. A. Ferrell, Predicted radiation of plasma oscillations in metal films, Physical Review, 111(5): 1214-1222, 1958.
- [5] Otto. A. Z. Phys. (1968), 216, 398.
- [6] E. Kretschmann and H. Raether, Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light, Z. Naturforsch. A, 23 :2135, 1968.
- [7] Charles T. Campbell, Surface plasmon resonance biosensor development,
- [8] Rich R. L. and D. G. Myszka, Advances in surface plasmon resonance biosensor analysis, Current opinion in biotechnology, 2000. 11(1): p54-61.
- [9] B. Liedberg, and C. Nylander and I. Lundstrom, Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing, Sensors and Actuators, 4:299-304, (1983).
- [10] Liu Wang and all, Trapping of surface plasmon polaritons in subwavelength cut, Optics communication 284 (2011) 153-155.
- [11] He Xiao-Yong, simulation investigation on channel surface plasmon guiding by terahertz wave through subwavelength metal V-groove, Optics and laser technology 41 (2009) 535-538.
- [11] J. Seidel, Propagation scattering and amplification of surface plasmons in thin silver films , -Thèse de doctorat de Technische Universität Dresden (2005).
- [12] K. Aslan, J.R. Lakowicz et C.D. Geddes,- Plasmon light scattering in biology and medicine : new sensing approaches, visions and perspectives, Current Opinion in Chemical Biology 9 (5), 538 (2005)
- [13] J. Homola, S.S. Yee et G. Gauglitz, Surface plasmon resonance sensors : review, Sensors and Actuators B - Chemicals 54 (1-2), 3 (1999)
- [14] H. Raether, Surface Plasmons on smooth an rough surfaces and on gratings, Springer Tracts on modern physics, Springer-Verlag, Berlin (1988)
- [2] A. Otto, I. Mrozek, H. Grabhorn et W. Akemann, Surface-enhanced ramanscattering, Journal of Physics-Condensed Matter 4 (5), 1143 (1992)
- [15] J. Homola, S. Yee, G. Gauglitz,- Surface plasmon resonance sensors: review, Sensors and Actuators- B54 (1999) 3-15.
- [16] W. Barnes, -Surface plasmon-polarition lenght scales: a route to sub-wavelenght optics, Journal of Optics- A 8 (2006) S87-S93.
- [17] W. Hickel, W. Knoll,- Surface-plasmon microscopy of lipid layers, Thin Solid Films -187 (1990) 349–356.
- [18] W. Hickel W.Knoll, -Surface plasmon microscopic imaging of ultrathin metal coatings Acta Metallurgica- 37 (1989) 2141-2144.

- [19] K-F. Giebel, C. Bechinger, S. Herminghaus, M. Riedel, P. Leiderer, U. Weiland, M. Bastmeyer,- Imaging of cell/substrate contacts of living cell with surface plasmon resonance microscopy-, Biophysical Journal 76 (1999) 509-516.
- [20] T.Zhang, H. Morgan, A. Curtis, M. Riehle, Measuring particle-substrate distance with surface plasmon resonance microscopy-, Journal of Optics A 3 (2001) 333-337.
- [21] E. Aust, M. Sawodny, S. Ito, W. Knoll, -Surface plasmon and guided optical wavemicroscopies, Scanning- 16 (1994) 353-361.
- [22] I. Smolyaninov, C. Davis, A. Zayats,- Image formation in surface plasmon polariton mirrors: Applications in high-resolution optical microscopy-, New Journal of Physics 7 (2005) 1-7.
- [23] D. Courjon, C. Bainier, -Le champ proche optique théorie et applications-, Springer-Verlag France (2001).
- [24] D. Tsai, J. Kovasc, Z. Wang, M. Moskovits, V. Shalaev, J. Suh, R. Botet, Photon

scanning tunneling microscopy images of optical excitations of fractal metal colloid

- clusters -Physical Review Letters 72 (1994) 4149-4152.
- [25] B. Hecht, H. Bielefeldt, L. Novotny, Y. Inouye, D.W. Pohl,- Local excitation, scattering, and interference of surface plasmons,- Physical Review Letters 77 (1996) 1889-1892.
- [26] S. Bozhevolnyi, A.Boltasseva, T. Søndergaard, T. Nikolajsen, K. Leosson, Photonic bandgap structures for long-range surface plasmon polaritons, Optics Communications 250 (2005) 328-333.
- [27] W. Barnes, A. Dereux, T. Ebbesen, Surface plasmon subwavelength optics, Nature 424 (2003) 824-830.
- [28] D. Kambhampati, W. Knoll, Surface-plasmon optical techniques, Current Opinion in Colloid & Interface Science 4 (1999) 273-280.
- [30] Biosensing with surface plasmon resonance- How it all started, B. Liedberg, C. Nylander, I. Lundström, Biosensors & Bioelectronics 10 (1995) i-ix.
- [31] Mémoire de Magister, Ben djabbour mohamad (2010-2011) université Abou Bekr Belkaid-Tlemcen "caractérisation d'une structure hétérogéne multicouche Application a la génération des modes plasmoniques".
- [32] A. Otto, Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection, Zeitschrift für Physik 216 (1968) 398-410.
- [33] J. Homola, "Surface plasmon resonance based sensors, Springer series on chemical sensors and biosensor/Methods and Applications," in Springer tracts in modern physics, Springer-Verlag Berlin ed., Heidelberg NY, v.4 (2006)
- [34] A. Otto, "The surface polariton resonance in attenuated total reflection", in Polaritons, proceedings of The First Taormina Research Conference on the Structure of Matter, October 2-6, 1972, Taormina, Italy, E. Burstein and F. De Martini ed., Pergamon (1974).
- [35] R. Ritchie, Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films, Physical Review 106 (1957) 874-881.
- [36] R. Ferrell, Predicted Radiation of Plasma Oscillations in Metal Films, Physical Review 111(1958) 1214-1222.
- [37] C. Powell, J. Swan, Effect of Oxidation on the Characteristic Loss Spectra of
Aluminium and Magnesium, Physical Review 118 (1960) 640-643.

- [38] E. Kretschmann, the determination of the optical constants of metals by excitation of surface plasmons, Zeitschrift für Physik 241 (1971) 313-324.
- [39] S. Lefrant, I. Baltog, M. Lamy de la Chapelle, M. Baibarac, G. Louarn, C. Journet, P. Bernier, Structural properties of some conducting polymers and carbon nanotubes investigated by SERS spectroscopy, Synthetic Metals 100 (1999) 13-27.
- [40] M. Baibarac, M. Cochet, M. Imageapkowski, L. Mihut, S. Lefrant, I. Baltog, SERS spectra of polyaniline thin films deposited on rough Ag, Au and Cu. Polymer film thickness and roughness parameter dependence of SERS spectra, Synthetic Metals 96 (1998) 63-70.
- [41] P. B. Johnson and R. W. Christy .Optical constants of the noble metals Phys. Rev. B 6, 4370 (1972)
- [42] H. Ehrenreich and H. R. Philipp .Optical constants of Ag and Cu Phys. Rev. 128, 1622 (1962)
- [43] U. Kreibig and M. Vollmer .Optical properties of metal clusters Springer Verlag, Berlin (1995)
- [44] N. W. Ashcroft an N. D. Mermin .Solid state physics Holt Saunders International Editions (1976)
- [45] Landolt-Börnstein .Metals : Phonon and electron states .Fermi surfaces, Vol. III/ 13c
- [46] G .Cyril docteur N° d'ordre : 2830 université bordeaux I 2004
- [46] Landolt-Börnstein .Phonon states of elements, ..., Vol. III / 13a
- [47] J. M. Ziman .Principles of the theory of solids .University Press of Cambridge 1969
- [48] N. D. Mermin .Lindhard dielectric function in the relaxation time approximation .Phys. Rev. B 1, 2362 (1970)
- [49] J. J. Quinn.Range of excited electrons in metals .Phys. Rev 126, 1453 (1962)
- [50] M. E. Kim, A. Das and S. D. Senturia .Electron scattering intercation with coupled plasmon/polar-phonon modes en degenerate semiconductors Phys. Rev. B 18, 6890 (1978)
- [51] C. Guillon docteur « Spectroscopie femtoseconde de structures métalliques, bimétalliques et de verres de silice à l'échelle nanométrique » N° d'ordre : 2830 université bordeaux I 2004
- [52] H. Fanet and H. Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, 6 éd., Paris, Dunod, 2009.
- [53] http://iramis.cea.fr/spcsi/cbarreteau/physique_du_solide, [Online] [Cited: aoû 14, 2011].
- [54] S.S. Li, Semiconductor physical electronics, 2 éd., New York, Springer, 2006.
- [55] D.A.Neamen, Semiconductor physics and devices, 3éd., New York, Mc Graw-Hill, 2003.
- [56] S.M. Sze and G.S. May, Fundamentals of semiconductor fabrication, Wiley, 2003.
- [57] R. Hull, Properties of crystalline silicon, London, INSPEC, 1999.
- [58] V. Lehmann, Electrochemistry of Silicon: Instrumentation, Science, Materials and Applications, Wiley, 2002.
- [59] S. Basu, Crystalline Silicon Properties and Uses, Rijeka (Croatia), In Tech, 2011.

- [60] H. Ben amrani These doctorat d'etat Thème « application àl'électronique moléculaire de couches minces des matériaux organiques » universite ferhat abbas setif (algerie), 2012
- [61] B.B. Nadia, Propriétés physiques des semiconducteurs (Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe, Mémoire de Magister, Université de Tlemcen, 2006.
- [62] A.Benmeddour, « Etude et Simulations Numériques des Contraintes thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque, » Mémoire de Magister, Université de Constantine, 2010.
- [63] L. Pidol, Scintillateurs Denses set Rapides pour la Détection de Rayonnement Gama Monocristaux à Base de Silicates de Lutécium Dopés, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2004.
- [64] L. Gheorghe, Les oxoborates non linéaires : croissance cristalline et propriétés optiques, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2007.
- [65] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques,
- 5 éd., Paris, Dunod, 2001
- [66] H. Fanet and H. Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, 6 éd., Paris, Dunod, 2009.
- [67] F. Marquier et al. Optics Communications 237 (2004) 379–388
- [68] http://iramis.cea.fr/spcsi/cbarreteau/physique_du_solide, [Online] [Cited: aoû 14, 2011].
- [69] S.S. Li, Semiconductor physical electronics, 2éd., New York, Springer, 2006.
- [70] R. Hull, Properties of crystalline silicon, London, INSPEC, 1999
- [71] H.R. Taft and E.A. Philipp, Optical Constants of Silicon in the Region 1to10 eV, Phys. Rev. B20 (1960) 37-38.
- [72] J.I. Pankov, Optical processes in semiconductors, New York, Dover, 1971
- [73] S.M. Sze and K.K. Ng, Physics of semiconductor devices, 3éd., New Jersey, Wiley, 2007.
- [74] Electromagnetic fields distribution in multilayerth in film structures and the origin of sensitivity enhancement in surface Plasmon resonance sensors



Spectroscopy Letters: An International Journal for Rapid Communication

Publication details, including instructions for authors and subscription information: <u>http://www.tandfonline.com/loi/lstl20</u>

Resonant Electromagnetic Field Distribution on Doped Multilayer Thin Film Structure

B. Bouhafs ^a , M. Benatallah ^a & M. Bendjebbour ^a

^a Theoretical Physics Laboratory, Faculty of Sciences Physics Department, University of Tlemcen, Tlemcen, Algeria

Accepted author version posted online: 25 Sep 2013. Published online: 05 Mar 2014.

To cite this article: B. Bouhafs, M. Benatallah & M. Bendjebbour (2014) Resonant Electromagnetic Field Distribution on Doped Multilayer Thin Film Structure, Spectroscopy Letters: An International Journal for Rapid Communication, 47:5, 397-403, DOI: <u>10.1080/00387010.2013.836109</u>

To link to this article: <u>http://dx.doi.org/10.1080/00387010.2013.836109</u>

PLEASE SCROLL DOWN FOR ARTICLE

Taylor & Francis makes every effort to ensure the accuracy of all the information (the "Content") contained in the publications on our platform. However, Taylor & Francis, our agents, and our licensors make no representations or warranties whatsoever as to the accuracy, completeness, or suitability for any purpose of the Content. Any opinions and views expressed in this publication are the opinions and views of the authors, and are not the views of or endorsed by Taylor & Francis. The accuracy of the Content should not be relied upon and should be independently verified with primary sources of information. Taylor and Francis shall not be liable for any losses, actions, claims, proceedings, demands, costs, expenses, damages, and other liabilities whatsoever or howsoever caused arising directly or indirectly in connection with, in relation to or arising out of the use of the Content.

This article may be used for research, teaching, and private study purposes. Any substantial or systematic reproduction, redistribution, reselling, loan, sub-licensing, systematic supply, or distribution in any form to anyone is expressly forbidden. Terms & Conditions of access and use can be found at http://www.tandfonline.com/page/terms-and-conditions



Resonant Electromagnetic Field Distribution on Doped Multilayer Thin Film Structure

B. Bouhafs, M. Benatallah, and M. Bendjebbour

Theoretical Physics Laboratory, Faculty of Sciences Physics Department, University of Tlemcen, Tlemcen, Algeria **ABSTRACT** In this article, we report a theoretical investigation of infrared surface plasmon polaritons on a doped silicon/air gap/doped silicon wave-guide. Obtained results reveal that the suggested structure sustains multiple surface plasmon polaritons whose angular resonances, dip positions, and full width at half maximum are highly sensitive to the carrier concentration of doped n-type silicon. For surface plasmon polaritons, their sensing characteristics measured on the reflectance and longitudinal power coupling factor profiles are greatly improved by means of a coupling prism material. We also show that a limit on the carrier concentration value of silicon contributes significantly to increase the quality factor.

KEYWORDS doped n-type silicon, longitudinal power coupling, metal insulator gap metal sensor, subwavelength regime, surface plasmon polaritons

INTRODUCTION

Over the past several years there has been a renewed interest in the use of the simplest Kretschmann-Raether configuration^[1] as a surface plasmon resonance (SPR) sensor for probing in real-time interface interactions and sensing of gases and biomaterials.^[2–7] The latter universal geometry consists of a thin metallic film of thickness d_m and permittivity ε_m , which is embedded between a BK7-prism coupling and a dielectric of permittivities, ε_p and ε_d , respectively, with the necessary condition $\varepsilon_p > \varepsilon_d$. Notice that various schemes^[8–15] and prism materials^[16] exist, allowing light to be coupled to bound SPPs, notably metallic grating and near-field coupling.

The metals commonly used to excite surface plasmon polaritons (SPPs)evanescent electromagnetic waves propagating along a metal-dielectric interface and coupled to collective oscillations of electrons are silver (Ag), aluminum (Al), and gold (Au) due to their remarkable optical properties described by the frequency-dependent complex permittivity, $\varepsilon_{\rm m}(\omega) = \varepsilon_{m}^{r}(\omega) + i\varepsilon_{m}^{i}(\omega)$ in the Drude model ($\varepsilon_{m}^{r} < 0$, $|\varepsilon_{m}^{r}| >> \varepsilon_{m}^{i}$). Since the SPR is the resonance phenomenon corresponding to an energetic transfer from incident light to SPPs, its excitation condition is highly sensitive to the refractive index changes, $nd = \sqrt{\varepsilon_{d}}$ of the medium surrounding the metallic conductor ($\varepsilon_{\rm m}$).

This paper was invited for publication in Spectroscopy letters after its presentation, as paper number 1340, at the Fourth International Meeting on Dielectric Materials (IMDM'4) held in Marrakech, Morocco between May 29th and May 31st, 2013. It is published as part of a special issue edited by M.E. Achour, of Tofail University, and A. Oueriagli, A. Outzourhit and K. Berrada of Cadi Ayyad University, Morocco.

Received 14 August 2013; accepted 15 August 2013.

Address correspondence to B. Bouhafs, Theoretical Physics Laboratory, Faculty of Sciences Physics Department, University of Tlemcen, PO Box 119, Tlemcen (13000), Algeria. E-mail: Bouhafs_ben@yahoo.fr

Color versions of one or more of the figures in the article can be found online at www.tandfonline. com/lstl. This characteristic inducing a shift in the reflectance profile versus the incidence angle θ_{SPR} gave birth to several applications for characterizing and quantifying bimolecular interactions. Here, it is important that all the other parameters of the structure must be suitably controlled if one seeks to optimize the confinement of SPPs to the metallic surface. To achieve the same goal (i.e., controlling the resonant modes phenomenon), more recently DiPippo et al.^[13] investigated both theoretically and numerically a proposed SPR platform with the use of a silicon grating on which a thin gold layer is deposited. The authors proved the ability of such doped Si structure to work like a biosensor. However, we found that with a doped Si coupler, the sensor performances are limited to trap single or multiple SPRs with an optimal energy transfer. With a similar configuration as in reference,^[13] Shahzad et al.^[18] conducted both analytical and experimental studies to investigate SPR modes with the use of a doped p-type Si grating. In an angular dependence, the resolution of the SPR characteristics, dip position and full width at half maximum (FWHM) of the reflectance, remains to be improved since the strongest SPR supported by the grating coupler is generated only at the normal incidence. In order to overcome these limits (SPRs weakly resolved) acquired by the structures adopted in references,^[13,18] detailed analysis of interface responses of a plasmonic sensor (referred to as an MIM waveguide) has been performed to achieve improved device performance on the carrier concentration sensitivity.

These resonant electromagnetic modes related to extraordinary optical transmission (EOT) the introduced in 1998 by Ebbessen et al.^[19] have been investigated on various geometries as optical tools to route light on a subwavelength scale and optimizing the sensing performance through variations of the size and shapes of nanostructures. However, the present contribution focuses on a theoretical investigation of infrared (IR) SPPs to describe sensing characteristics achieved in a doped n-type silicon (d_{m1})/insulator gap (d_g)/doped n-type silicon waveguide. Otherwise, the optical characteristics of this kind of SP microcavity are particularly discussed in terms of both the power coupling factor and the reflectance under the influence of the carrier concentration, N, of the involved conductor (Si); the width, d_g ; and the optical nature, n_g , of the insulator gap. The designed sensor excited at a wavelength in the range of 1–20µm supports resonant electromagnetic field distribution at the SPR. The use of doped Si instead of noble metals like Ag and Au (among others) provides additional tools to manipulate the optical response in the vicinity of a conductor-dielectric interface for sensing applications. According to the experimental work of Lee et al.,^[20] with a bimetallic waveguide of SF10 prism/Ag/ZnS-SiO₂/Au/water buffer, in the visible spectrum, a substantial enhancement in resolution is achieved. For a same motivation with a specific insulator gap characterized by a complex refractive index, n_o, a plasmonic structure with silver will be reported in a forthcoming contribution. For this reason, a comparison with silver or gold has not been included in the present article.

SCHEMATIC OF FOUR-LAYER GEOMETRY UNDER STUDY

The typical doped sensor referred as a metal-Insulator-metal (MIM) structure under study is depicted in Fig. 1, where a dielectric gap of a real permittivity, d_g , and width, d_g , is stacked between two semiinfinite conductors of a frequency-dependent permittivity, $\varepsilon_{m1}(\omega)$; $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ is the angular frequency of incident light, and c is the speed of light in vacuum. A p-polarized light passes through a BK 7-prism, causing the light to internally reflect at the first



FIGURE 1 Schematic illustration of the experimental setup (1D) for measuring the reflectance as a function of the incidence angle at an operating wavelength in the IR/visible range. All the materials are assumed to be nonmagnetic.

boundary between the metal up (e_{m1}) and the prism coupling. The total internal reflection induces an evanescent wave that penetrates in both the thin metallic layer (e_{m1} , d_{m1}) and the insulator gap (ε_{g} , d_{g}) and propagates along the \boldsymbol{u}_{x} direction. The existence of SPs is pronounced by a drop in the reflected light versus the angle of incidence, $\theta_i = \theta_{SPR}$, when a phase-matching condition on the propagation constant, $\beta_{\rm SP}$, of the SP is satisfied, that is, $(2\pi/\lambda)\sqrt{\varepsilon_p \sin \theta_i} = \operatorname{Re}\{\beta_{SP}\}$. The latter dispersion relation of SPPs is valid for both real and complex, $e_{m1}(\omega)$, that is, for metals without and with attenuation. Although the electromagnetic field of an SPP decays evanescently into both the material up (ε_{m1}) and insulator gap, the majority of the field is present in the insulator gap due to increased damping in the material up. In such an MIM structure, when the thickness, d_{m1}, is thin enough and the thickness, d_o, is suitably controlled, the coupling process occurs between SPPs giving rise to coupled modes. Additionally, the coupling between SPPs at the two interfaces, metal up/insulator gap and insulator gap/metal down, changes significantly when the dielectric permittivities of the materials (metal up, metal down) are different. Taking a doped n-type Si/air gap/doped n-type Si as an example, it is important to understand the behavior of the coupling energy of SPPs on the width (adjusted around the incident wavelength, λ) of the insulator gap and the carrier concentration, N, of the conductor (Si).

THEORETICAL CONSIDERATIONS

The SPR response is translated on the reflectivity in the vicinity of the interfaces of the above MIM structure irradiated in p-polarized light (transverse magnetic). In this condition, if we consider that the metal up (referred to as a medium j) occupies the coordinate $d_g < z < d_{m1}$ and the SPP is assumed to propagate along the x-axis, the electric field in the medium m_1 of the SP can be written as

$$< \boldsymbol{E}_{j} = E_{jx} \left\{ \begin{pmatrix} 1\\0\\\frac{k_{x}}{k_{zj}} \end{pmatrix} \exp\left\{i\left(k_{x}x - k_{zj}(z-d)\right)\right\} + rj \begin{pmatrix} -1\\0\\\frac{k_{x}}{k_{zj}} \end{pmatrix} \exp\left\{i\left(k_{x}x + k_{zj}(z-d)\right)\right\} \right\} e^{-i\omega t}, \quad (1)$$

where E_{jx} is the amplitude of the field, x is the angular frequency, t is time, and k_x and $k_{zj} = \frac{2\pi\sqrt{\epsilon_j}}{\lambda} \cos\theta$ are the in-plane and perpendicular wave vector components along x and z in the medium j of a reflection coefficient r_j , respectively. Using a similar form of Eq. (1) to determine the electric fields \boldsymbol{E}_{m1} , \boldsymbol{E}_g , and \boldsymbol{E}_{m2} propagating in the media of the MIM waveguide and for which we applied the appropriate boundary conditions across the interfaces, the procedure leads to write the reflectance $R = |r_p|^2$ between the prism coupler and the metal up as

$$r_{p} = \frac{\varepsilon_{m1}k_{zp}(1+A) - \varepsilon_{p}k_{zm1}(1-A)}{\varepsilon_{m1}k_{zp}(1+A) + \varepsilon_{p}k_{zm1}(1-A)},$$
(2)

where

$$A = r_{m1} exp[2ik_{zm1}(d - d_g)]$$

$$r_{m1} = \frac{\varepsilon_g k_{zm1}(1 + G) - \varepsilon_{m1} k_{zg}(1 - G)}{\varepsilon_g k_{zm1}(1 + G) + \varepsilon_{m1} k_{zg}(1 - G)}$$

$$G = r_g exp[2ik_{zg} d_g]$$

$$r_g = \frac{\varepsilon_{m2} k_{zg} - \varepsilon_g k_{zm2}}{\varepsilon_{m2} k_{zg} + \varepsilon_g k_{zm2}}$$

Here, the thickness, $d_{m1}=(d-d_g)$, of the metal up must be controlled to perform the coupling efficiency measurements between the two interfaces of the MIM waveguide at an incident wavelength, λ . As we are concerned to trap resonant modes through the insulator gap, the light-SPP coupling efficiency is defined as the ratio between the longitudinal component of the transmitted electric field, \boldsymbol{E}_{m2} , at the entrance of the material down and the incident field, \boldsymbol{E}_{p} , onto the upper incident medium (prism coupler):

$$P_{MIM} = \frac{|E_{m2} \cdot u_x|_{z=0}}{|E_p \cdot u_x|_{z=d}}$$

$$= \frac{|\frac{(1-r_p)(1-r_m)(1-r_g)}{(e^{-ik_{zg}d_g} - r_g e^{ik_{zg}d_g})}|$$

$$(3)$$

$$(e^{-ik_{zm1}[d-d_g]} - r_{m1}e^{ik_{zm1}[d-d_g]})$$

Simulated Characteristics of Doped n-Type Si

In the IR range considered for the case of silicon, the dielectric permittivity depending on the

Resonant Electromagnetic Field Distribution

TABLE 1 Optical parameters of doped-n type Si from reference [21]

Carrier concentration N(×10 ²⁰ cm ⁻³)	Wavelength λ (μ m)	Complex permittivity $\varepsilon_{\rm Si}$ (N, λ)	Resistivity ρ (×10 ⁻³ Ω cm)
2	8.03	-24.08+i15.86	0.5
4		-49.08+i38.82	0.36

contribution of the carrier's charge is characterized by the Drude model:

$$\varepsilon_{si}(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} + i \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}$$

$$\omega_p^2 = N \frac{e^2}{m^* \varepsilon_0}$$

$$\gamma = N \frac{e^2 \rho}{m^*},$$
(4)

 $\varepsilon_{\infty} = 11.7, \quad \varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-11}, \quad m^* = 2.457 \times 10^{-11},$ where 10^{-31} kg, ρ is the resistivity, N is the carrier concentration, e is the electron charge, and $\omega_{\rm b}$ and γ are the plasma frequency and the damping term, respectively. In the wavelength range of $1-20\,\mu\text{m}$, such a model of the permittivity for silicon is according to the doping type (n or p), and the existence range of SPs is not the same. In other words, for high carrier concentrations, the existence range of SPs is shifted toward the near-infrared range. Here, the incident wave is selected to be 8.03 μ m and the complex permittivity, ε_{Si} , is directly determined by the carrier concentration, N, and resistivity, ρ , as summarized in Table 1. Eq. (2) predicts that optical properties of Si in the infrared frequencies can be modified by varying the carrier concentration and resistivity. With the latter consideration, the optical behavior of the doped-Si is similar to that of metallic conductors; that is, the condition $Re(\varepsilon_{Si}(\omega)) \leq -1$ is satisfied.

RESULTS AND DISCUSSION

To understand the influence of the geometrical parameters of the suggested MIM structure on both the SPR and coupling factor profiles, first we consider the conventional sensor, that is, prism/doped n-type Si/ambient air. Using Eq. (2), we turn to determine particularly the optimal thickness, $d_{m1}=0.2\,\mu$ m, for which a strong trapped resonance with a narrow FWHM is excited. In this condition, the theoretical treatment reveals that an SPR is sustained at the incidence angle $\theta_{SPR} \approx 45^{\circ}$, where the

sharp dip position of the reflectance decreases to its minimal value of 25.5% (Cf. Fig. 2, dotted line). So, with a fixed carrier concentration of N=4× 10²⁰ cm⁻³, the SPP field penetration depths into the dielectric (air: $\varepsilon_d = 1$) and the Si ($\varepsilon_{Si} = -49.0 +$ i38.82) are 9.5 μ m and 0.2 μ m, respectively. From this quantitative analysis, it is clear that the most SPP field remains confined in the conductor medium (Si). To compare sensing characteristics of the Kretschmann-Raether geometry, we report the calculated reflectance (Cf. Fig. 2, solid curve) predicted on a prism $(\varepsilon_p = 2.1)$ /doped n-type Si/insulator gap/doped n-type Si, where the width, dg, of the insulator gap is fixed to $8.05 \mu m$. In the same conditions in terms of the incident wavelength, $k=8.03\mu m$, and the carrier concentration, N, the proposed MIM sensor has an advantage of supporting three reflectance dips by choosing the width, d_g , in the order of λ . From this comparative study, it can be concluded that the first mode of SPR (right peak) is shifted to $\theta_{SPR} \approx 45.7^{\circ}$ and its dip position achieves a minimum value of 29.5%. Furthermore, the corresponding wavelengths of SP modes trapped in the multilayer



FIGURE 2 Calculated angular reflectance spectra with the conventional SPR sensor (red line) and the doped MIM structure (black line) at 8.03 μ m wavelength excitation.

stack are 22.6, 8.55, and 7.71 μ m. However, in the case of the Kretschmann SPR, the reflectivity does not reach unity again. The reason for the lower than unity reflectance is radiative losses.

The thickness, d_{m1} , of the material up in the MIM waveguide plays a crucial role in the energetic transfer from the incident light to SPR. To underline the latter effect, the reflectance versus the incidence angle is depicted in Fig. 3 for the MIM waveguide. An optimal energetic transfer to SPR is achieved when the thickness, d_{m1} , is tuned to 80–100 nm. In this condition, three resonant modes with different quality factors $(Q = \lambda / \Delta \lambda)$ are distinctly generated where dip positions drop to 0%. For larger values of d_{m1}, the reflectance predicts the excitation of three distinct SPR modes where the dip position increased to 60%. This property is predictable because for thicker material up, much of the incident energy is lost by multiple reflections. In other words, the excitation of a weaker SPR is due to the attenuation of the diffracted evanescent wave to the Si-medium interface. Also, the sensitivity of the MIM structure on the thickness, d_{m1} , is apparent on the SPRs; that is, resonance angles of SP modes are shifted. In order to show carrier concentration effects on the SPRs of the MIM waveguide, the reflectance is calculated and depicted in Fig. 4, where the thickness and the width of the insulator gap are fixed to 0.2µm and 8.05µm, respectively. Here, it is observed that an optimal energetic transfer of 5% (for the higher angle



FIGURE 3 Change of angular reflectance with increasing n-doped Si thickness, d_{m1} , for a fixed carrier concentration, $N = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.



FIGURE 4 Change of angular reflectance with increasing carrier concentration of n-doped Si.

SPR, $\theta_{SPR} \approx 46.74^{\circ}$) from light to SP modes can be carried out in the case of a lower carrier concentration, N=2×10²⁰ cm⁻³. The effect of the carrier concentration, N, on the reflectance is almost similar to that of dm1; that is, by increasing, N SPRs are shifted, dip positions are increased, and the profile is widened. As an example, for the lower SPR mode excited at $\theta_{SPR} \approx 16.7^{\circ}$, the full width at half maximum (FWHM ~ 13.29 µm for N=2×10²⁰ cm⁻³) leads to estimate the quality factor on the order of 1.5. Finally, to illustrate the behavior of two sensing characteristics (dip positions and SPRs) of SPs supported in the MIM waveguide on the influence of the carrier



FIGURE 5 Effects of the carrier concentration on the dip position and SPR angle of the first mode (see Fig. 4) excited trapped in the MIM waveguide where d_{m1} and d_g are fixed to 0.2 µm and 8.05 µm, respectively.

concentration, it can be seen from Fig. 5 that the resonance angle (of the first mode as an example) remains constant as N changes from 2×10^{20} to 5×10^{20} cm⁻³ but the corresponding dip position increases in a polynomial fit (solid curve).

In the above part, we have shown the ability of the MIM structure to store three resonant modes measured on the reflectance and whose sensing characteristics are significantly affected by the material thickness and carrier concentration. The observed modes are consequently due to the coupling process between the two interfaces of the MIM structure. In order to show the effects of the insulator width, d_{o} , and carrier concentration, N, on the longitudinal confinement factor preserved in this coupling process, the confinement factor is displayed in Figs. 6, 7, and 8 in different conditions. The results show that the coupling modes are characterized by a resonant electromagnetic field distribution (sharp peak) for a weak carrier concentration of 2×10^{20} cm⁻³, while dg and dm1 are fixed in a subwavelength regime, that is, $d_g \ll \lambda$. This confinement factor can be optimized on the insulator width, $d_g=0.6\mu m$, with other parameters remaining fixed. In this particular regime, the sharp peak localized at the angle of 45.25° in the case of Fig. 7 corresponds to the superposition effect between the two identical SPP modes on each of the interfaces. In the other regime for $d_{\rho} \ge \lambda$ (Fig. 8), when the width is increased, the light-SPP coupling efficiency decreases and a pair of coupled modes are



FIGURE 6 Calculated longitudinal confinement factor as a function of the angle of incidence for a doped n-type Si sensor with different carrier concentrations, 2, 3, 4, and 5×10^{20} cm⁻³.



FIGURE 7 Calculated longitudinal confinement factor in the subwavelength regime as a function of the angle of incidence for a doped n-type Si sensor with different air gaps, $d_g=0.4$, 0.5, 0.6, 0.7, 0.75, and 0.8 μ m. The other parameters are specified in the inset of the figure.

pronounced. However, for a carrier concentration $N \ge 4 \times 10^{20}$ cm⁻³, the confinement factor is weakened due to the increase of the imaginary part of the Si permittivity (Cf. Table 1).

Thus, from the point of view of potential applications, the first mode excited in the proposed MIM waveguide is of the most interest since it is a wellpronounced, high-quality factor, Q, and provides a strong confinement factor.



FIGURE 8 Calculated longitudinal confinement factor as a function of the angle of incidence for a doped n-type Si sensor with different air gaps, such as $d_{a} > \lambda$, with $N = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

CONCLUSION

The theoretical approach based on Maxwell's equations demonstrates the potential of the proposed doped n-type Si sensor with a prism coupler to investigate with high resolution the resonant characteristics of SPs. The light-SP coupling efficiency due to the strong field preserved in the insulator gap is substantially optimized in the increase of the insulator width. Notice that the changes of the microcavity width and thickness give rise to multiple SPR wavelengths, allowing the control of the quality factor Q (Fabry-Perot cavity) relative to the carrier concentration of the doped n-type Si. The resonances were distinct, and although rather broad for the lower carrier concentration, they may have value, which offers the opportunity for sensing applications.

REFERENCES

- Kretschmann, E.; Raether, H. Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light. Z. Naturforsch. A 1968, 23, 2135–2136.
- Homola, J. Present and future plasmon resonance biosensors. Anal. Bioanal. Chem. 2003, 377(3), 528–539.
- Phillips, K. S.; Cheng, Q. Recent advances in surface plasmon resonance based techniques for bioanalysis. *Anal. Bioanal. Chem.* 2007, 387(5), 1831–1840.
- Hoa, X. D.; Kirk, A. G.; Tabrizian, M. Towards integrated and sensitive surface plasmon resonance biosensors: A review of recent progress. *Biosens. Bioelectron.* 2007, 23(2), 151–160.
- Abdulhalim, I.; Zourob, M.; Lakhtakia, A. Surface plasmon resonance sensors: A mini review. *Electromagnetics* 2008, 28, 214–242.
- Homola, J. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species. *Chem. Rev.* 2008, 108(2), 462–493.

- Green, R. J.; Frazier, R.; Shakesheff, K.; Davies, M.; Roberts, C.; Tendler, S. Surface plasmon resonance analysis of dynamic biological interactions with biomaterials. *Biomaterials* 2000, *21*, 1823–1835.
- 8. Wood, R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *Phil. Mag.* **1902**, *4*, 396.
- 9. Fano, U. Theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces. J. Opt. Soc. Am. **1941**, 31, 213–222.
- Ritchie, R. H.; Arakawa, E. T.; Cowan, J. J.; Hamm, R. N. Surfaceplasmon resonance effect in grating diffraction. *Phys. Rev. Lett.* **1968**, *21*, 1530–1533.
- 11. Ford, G. W.; Weber, W. H. Electromagnetic interactions of molecules with metal surfaces. *Phys. Rep.* **1984**, *773*, 195–287.
- Barnes, W. L. Fluorescence near interfaces: The role of photonic mode density. J. Mod. Opt. 1998, 45, 661–699.
- Long, L. J.; Jie, L.; Fai, Z. H.; Yan, Z.; Tin, L. S. Numerical analysis of surface plasmon nanocavities formed in thickness-modulated metalinsulator-metal waveguides. *Chin. Phys. B* 2010, 79(5), 054201.
- Glushko, O.; Brunner, R.; Meisels, R.; Kalchmair, S.; Strasser, G. Extraordinary transmission in metal hole array-photonic crystal hybrid structure. *Opt. Express* **2012**, *20*(15), 17174–17182.
- Yu, Z.; Liang, R.; Chen, P.; Huang, Q.; Huang, T.; Xu, X. Integrated tunable optofluidics optical filter based on MIM side-coupled-cavity waveguide. *Plasmonics* **2012**, *7*, 603–607, DOI: 10.1007/s11468-012-9348-2.
- Patskovsky, S.; Kabashin, A. V.; Meunier, M.; Luong, J. H. T. Properties and sensing characteristics of surface plasmon resonance in infrared light. J. Opt. Soc. Am. A 2003, 20, 1644–1650.
- DiPippo, W.; Lee, B. J.; Park, K. Design analysis of doped-silicon surface plasmon resonance immunosensors in mid-infrared range. *Opt. Exp.* **2010**, *78*, 19396.
- Shahzad, M.; Medhi, G.; Peale, R. E.; Buchwald, W. R. Infrared surface plasmons on heavily doped silicon. J. Appl. Phys. 2011, 110, 123105.
- Ebbesen, T. W.; Lezec, H. J.; Ghaemy, H. F.; Thio, T.; Wolf, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature* **1998**, *391*, 667–669.
- Lee, K.-S.; Sun, J.-M.; Jeong, D.-Y.; Lee, T. S.; Kim, W. M. Resolution enhancement in surface plasmon resonance sensor based on waveguide coupled mode by combining a bimetallic approach. *Sensors* 2010, *70*, 11390-11399, DOI:10.3390/s101211390.
- Vinà, L.; Cardona, M. Effect of heavy doping on the optical properties and the band structure of silicon. *Phys. Rev. B* 1984, 29, 6739–6751.