

# THESE

Présentée par

**Souraya GOUMRI-SAID**

Pour obtenir

**LE GRADE DE : DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE BOURGOGNE**

**Spécialité : Physique**

**Contribution à l'étude de la formation des images  
optiques en microscopie champ proche optique: effet  
de la sonde en deux dimensions**

**Soutenue le 08 Octobre 2004 à 10 H 30 devant la commission d'examen :**

Daniel Courjon	<b>Rapporteur</b>	Directeur de Recherche, Université de Franche-Comté
Dominique Barchiesi	<b>Rapporteur</b>	Professeur, Université de Troyes
Hans-Rudolf Jauslin	<b>Président</b>	Professeur, Université de Bourgogne
Alexandre Dazzi	<b>Examineur</b>	Maître de Conférence, Université de Paris-Sud
Jean Paul Dufour	<b>Directeur de Thèse</b>	Professeur, Université de Bourgogne
Laurent Salomon	<b>Directeur de Thèse</b>	Maître de Conférence, Université de Bourgogne

## Dédicaces

*A l'âme de ma grand mère,  
A mes parents,  
A ma grande sœur Djamilia,  
A mon très cher et tendre Benali,  
A Kheira et Karim.*

# Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique de l'Université de Bourgogne Il est d'usage de commencer la description de tout travail conséquent par des remerciements. Ce n'est pas pour moi une corvée mais une joie profonde et un aveu sincère d'humilité.

Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements aux personnes qui ont accepté de faire partie du jury :

M. Hans-Rudolf Jauslin, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de thèse,

M. Daniel Courjon, qui m'a fait l'honneur d'accepter d'être rapporteur de ce travail, et de m'aider à améliorer la qualité du manuscrit. Ces remarques sur la fonction de transfert et les sondes à 2D m'ont appris beaucoup de choses,

M. Dominique Barchiesi, l'un des précurseurs des calculs théoriques en champ proche. Il m'a fait le très grand plaisir d'accepter le rôle de rapporteur de ce manuscrit. Ces questions sur la méthode différentielles et sa connaissance des autres méthodes m'ont permis d'évaluer mes connaissances en calcul de champ proche,

M. Alexandre Dazzi, qui m'a fait un immense plaisir en acceptant d'être examinateur de ce travail. Notre travail de collaboration sur le proche infrarouge m'a permis d'envisager d'inclure l'effet de la sonde et d'élargir l'application du modèle développé. Je le remercie aussi pour la discussion sur le guidage des modes dans les sondes notamment dans le chapitre 4.

Je devrais à présent remercier mes directeurs de thèse, j'ai eu la chance d'avoir deux :

M. Laurent Salomon, souvent qualifié d'Obélix du champ proche de notre groupe. C'est le père adoptif de la méthode différentielle du groupe, il est à l'origine de ces applications diverses depuis une décennie déjà !! (*...l'esprit qui invente est toujours mécontent de ses progrès, parce qu'il voit au-delà..[Jean le Rond d'Alembert]*) . J'ai eu une grande chance de travailler avec lui, je n'étais pas du domaine quand je suis arrivée au groupe en fin 2000, au cours de ma thèse, sa présence permanente (je ne pouvais pas le rater car on partageait le même bureau D412 !!) m'a permis de me convertir à ce domaine très passionnant, et d'apprendre à programmer et de faire travailler ma tête et surtout faire parler la physique (difficilement mais il réussissait souvent !!). Ce travail de grande haleine n'aurait pas pu exister sans les qualités scientifiques, pédagogique et humaines très rares de Laurent. J'ai fait mes premiers pas de l'enseignement au Creusot grâce à son aide précieuse, je garderai toujours ce souvenir de la navette Dijon-Creusot, en contemplant les beaux paysages et les

champs des vignes. Mes remerciements sont difficiles à exprimer, sans lui ce travail n'aurait jamais vu le jour.

M. Jean Paul Dufour, je le remercie d'avoir aussi accepté de diriger cette thèse et de m'avoir aidé dans la rédaction finale de ce manuscrit. Sans son aide, ce travail n'aurait jamais été présenté sous cette forme. J'ai eu l'honneur d'être la dernière étudiante en thèse de Jean Paul. Malgré son planning de doyen très chargé, il trouvait le temps suffisant et nécessaire pour être efficace dans les corrections de français de mes différentes versions (*...Tu me dis, j'oublie. Tu m'enseignes, je me souviens. Tu m'impliques, j'apprends. [Benjamin Franklin]*). Je le remercie aussi pour sa bonne humeur et ses encouragements constants durant la rédaction. Je prenais un énorme plaisir de l'écouter parler de ces souvenirs en Algérie comme son voyage dans le Sahara et Taghit (l'enchanteresse...), ses connaissances riches de cultures différentes m'ont permis d'oublier le stress.

Je tiens aussi à remercier, Madame Frédérique de Fornel, notre chef d'équipe, de m'avoir accepté en thèse dans son groupe et pour sa confiance en moi. Une élégante dame avec des qualités humaines et pédagogiques exceptionnelles qui ont fait naître une ambiance de grande famille au sein du groupe. Je la remercie pour ses idées originales dans mon sujet et ses discussions de tout les résultats présentés dans ce travail (*... Il faut bien que je les suive, puisque je suis leur chef... [Ledru-Rollin]*). Ça prudence de ne pas donner des conclusions générales et d'aller au plus loin dans l'interprétation des courbes m'ont beaucoup appris dans la manière de faire la recherche et aussi la persévérance. Elle était présente à mes cotés jusqu'à la veille de ma soutenance, ça m'a beaucoup touché, je ne cesserai de la remercier pour ces encouragements.

Je remercie aussi MM. Jean-Jacques Gaillard et Jean-Christophe Basaille, du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne. Ils ont assuré le bon fonctionnement et améliorer les performances des machines durant toute la période de ma thèse, ce qui m'a permis de réussir à étudier des sondes réalistes. Ils ont toujours été présents pour répondre à nos questions, je les en remercie.

Quand on fait une thèse, on doit sûrement rencontré des gens de notre espèce, les thésards, souvent je les voyaient au distributeur de café avec une cigarette, on parle de tout et de rien et surtout après la thèse.... J'ai eu l'honneur de rencontrer des thésards remarquables et marrants et surtout de différentes cultures. Je commence par remercier tous mes collègues thésards du groupe d'optique de champ proche : les anciens : Lotfi Berguiga: merci pour tes gâteaux tunisiens un jour de l'aïde el fitr, c'était très délicieux, Davy Gérard : bon courage à Paris !. Youcef Haidar et Maher Al-Naboulsi : bonne chance pour la rédaction. Par l'intermédiaire de l'école doctorale et Restaurant Monmuzard, j'ai connu un thésard chimiste, un spécimen rare surtout quand il est en Blouse blanche, Aziz Fihri, qui a perdu dix kilogrammes en faisant des manipulations: bon courage pour la dernière ligne droite!! Les visiteurs du CEA de Grenoble, Merad Karim et Kanoun Benali, une paire inséparable depuis les années fac à Tlemcen, je leurs remercie de m'avoir aidé dans ma recherche bibliographique, en m'envoyant des articles en pdf (normal c'est le CEA !!) .

Pendant mon séjour au campus universitaire, j'ai connu beaucoup de gens sympa et différents parmi eux : Kristin, Malika, Fatiha, Romain ( le moustachu), Zoheir et Habib (le gros !!), on a passé des moments inoubliables, au cinéma et à la fête de la musique (une fête que j'ai découvert en France), je n'oublierai jamais les fous rires au Resto Montmuzard et à la cité, bien que je prenais souvent des avertissements des veilleurs de nuits.

-----

*La route se poursuit inlassablement  
Descendant de la porte où elle commençait  
Maintenant, loin en avant la route est parvenue,  
Et je dois suivre, si je le puis  
La poursuivant d'un pied las,  
Jusqu'à ce quelle rencontre quelque voie plus large  
Où maints sentiers et courses se rencontrent.  
Et où alors? Je ne saurais le dire.*

*J.R.R. Tolkien  
(Le Seigneur des Anneaux)*

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>13</b>
<b>1 Etat de l’art</b>	<b>17</b>
1.1 Considérations générales sur le champ proche optique . . . . .	17
1.1.1 Champ lointain . . . . .	17
1.1.2 Champ proche . . . . .	18
1.2 Différents types de microscopes optiques en champ proche . . . . .	21
1.2.1 Sondes avec ouverture . . . . .	21
1.2.2 Microscopies à pointes sans ouverture (ou “Aperturless”) . . . . .	24
1.3 Rôle de la sonde dans la formation des images optiques . . . . .	25
1.3.1 Modèle analytique pour le PSTM . . . . .	25
1.3.2 Fonction de transfert . . . . .	27
1.4 Modèles théoriques . . . . .	29
1.4.1 Modèles théoriques pour le SNOM en mode illumination . . . . .	29
1.4.2 Modèles théoriques pour le SNOM en mode réflexion . . . . .	30
1.4.3 Modèles théoriques pour les calculs de diffusion par une pointe placée dans le champ proche . . . . .	30
1.4.4 Modèles théoriques du SNOM mode collection: cas du PSTM . . . . .	31
1.5 Conclusion . . . . .	34
<b>2 Outil théorique</b>	<b>37</b>
2.1 Méthode Différentielle . . . . .	38
2.1.1 Equations de Maxwell appliquées aux réseaux 1D. . . . .	38
2.1.2 Propriétés des composantes du champ électromagnétique. . . . .	42
2.1.3 Expression du champ dans la zone modulée. . . . .	45
2.1.4 Matrices de Réflexion et de Transmission d’un réseau . . . . .	46
2.1.5 Problème numérique . . . . .	48
2.2 L’algorithme de propagation S . . . . .	48
2.2.1 Algorithme de propagation T . . . . .	49
2.2.2 Algorithme de propagation S. . . . .	52
2.3 Système: objet sub-longueur d’onde avec sonde . . . . .	59

2.3.1	Calcul du signal collecté par la sonde . . . . .	59
2.3.2	Optimisation des paramètres numériques: cas du PSTM . . . . .	61
2.4	Conclusion . . . . .	67
<b>3</b>	<b>Simulation d'images PSTM en mode à hauteur constante avec une sonde monomode</b>	<b>69</b>
3.1	Position du Problème . . . . .	69
3.2	Installation du mode guidé . . . . .	71
3.3	Influence de la forme de la sonde . . . . .	74
3.4	Effet de la distance sonde-objet . . . . .	77
3.5	Effet des indices de réfraction de l'objet et de la sonde . . . . .	78
3.6	Effet de l'angle d'incidence . . . . .	80
3.7	Etude des fonctions de transfert dans un PSTM . . . . .	81
3.7.1	Calcul de la fonction de transfert . . . . .	81
3.7.2	Concept de sonde passive . . . . .	83
3.7.3	Etude des Fonctions de transfert d'une sonde monomode . . . . .	85
3.8	Conclusion . . . . .	87
<b>4</b>	<b>Etude de la formation des images optiques obtenues avec des sondes multimodes</b>	<b>89</b>
4.1	Analyse modale . . . . .	89
4.1.1	Rappel sur le calcul des modes dans un guide planaire . . . . .	89
4.1.2	Calcul du flux pour chaque mode propre de la sonde . . . . .	91
4.2	Analyse des images optiques obtenues avec des sondes multimodes . . . . .	94
4.2.1	Sonde de diamètre $D = 4\mu m$ . . . . .	95
4.2.2	Effet de la taille de l'objet . . . . .	99
4.2.3	Etude des sondes larges: $D = 10\mu m$ et $D = 25\mu m$ . . . . .	100
4.3	Conclusion . . . . .	104
<b>5</b>	<b>Etude en champ proche des images obtenues avec des sondes structurées</b>	<b>107</b>
5.1	Position du problème . . . . .	107
5.2	Sondes monomodes . . . . .	109
5.3	Sondes multimodes . . . . .	112
5.4	Comparaison avec des résultats expérimentaux . . . . .	113
5.5	Conclusion . . . . .	117
<b>6</b>	<b>Etude de l'effet de la sonde dans la détection du champ proche en infrarouge</b>	<b>121</b>
6.1	Position du problème . . . . .	121
6.2	Description du système . . . . .	122
6.3	Analyse du champ-proche optique: influence de l'épaisseur de l'échantillon	124
6.4	Spectroscopie . . . . .	126

<i>Table des matières</i>	5
6.4.1 Spectroscopie sans la sonde . . . . .	126
6.4.2 Spectroscopie en présence de la sonde . . . . .	129
6.5 Conclusion . . . . .	132
<b>Conclusion</b>	<b>133</b>
<b>Annexe A</b>	<b>135</b>
<b>Annexe B</b>	<b>145</b>





# Table des figures

1.1	Définition de la zone champ proche par un objet éclairé en réflexion ou en transmission. La surface de l'objet est définie par $z = S(x, y)$ . . . . .	18
1.2	Les différentes techniques de microscopie en champ proche : (a) SNOM en mode illumination. (b) SNOM en mode collection. (c) SNOM en réflexion interne. (d) Microscopies à effet tunnel optique (PSTM). (e) Pointe diffusante placée dans le champ proche. Dans chaque cas $I(x,y)$ représente le signal collecté en champ proche pour former l'image. . . . .	22
1.3	(a) Principe du 2D-PSTM. (b) Approximation dipolaire du 2D-PSTM . . .	25
2.1	Schéma d'un réseau à 1 Dimension. Ce schéma définit les principales notations et les caractéristiques physiques introduites dans le texte. . . . .	40
2.2	Empilement des différentes couches dans la zone modulée. Notation des coefficients de Rayleigh dans les zones homogènes, pour définir les algorithmes matriciels. $M$ constitue le nombre de couches utilisées pour découper la zone modulée . . . . .	49
2.3	Présentation du système global (substrat-objet-sonde). . . . .	57
2.4	Distribution du champ électrique pour une période de $12\mu m$ (257 modes), $24\mu m$ (513 modes) et $48\mu m$ (1025 modes), calculée à une distance $y_0 = 10nm$ au dessus de l'objet de taille $100 \times 100(nm^2)$ . $\theta = 60^\circ$ , $\lambda = 632.8nm$ . . . . .	63
2.5	Effet du nombre de modes sur le système sonde-objet, pour un nombre de couches donné et une période donnée. . . . .	65
2.6	Effet du nombre de couches pour un nombre de modes donnés et une période donnée. . . . .	66
2.7	Effet de la période pour un nombre de modes et un nombre de couches suffisant $M = 50$ . . . . .	67
3.1	(a) Réflexion totale et confinement de l'onde évanescente, (b) Principe de détection du champ proche par une sonde. . . . .	70
3.2	Schéma de la configuration PSTM à 2 dimensions. . . . .	71
3.3	Variation du signal transmis en fonction de la longueur $a_1$ de la partie rectangulaire de la sonde. . . . .	72

3.4	Variation du signal transmis en fonction des positions de la sonde quand elle balaye à hauteur constante le système objet-substrat pour différentes longueurs de sonde: (a) $l_p = 3600nm$ , (b) $l_p = 4000nm$ et (c) $l_p = 6815nm$	74
3.5	Schéma des 3 formes des sondes. La longueur de la sonde est $l_p = a_1 + a_2 + a_3$ .	75
3.6	La variation du signal transmis en fonction de la longueur des trois sondes. (a) forme 1, (b) forme 2 et (c) forme 3. . . . .	76
3.7	Signal collecté par les trois types de sonde quand elles balayent à hauteur constante un objet sub-longueur d'onde $100 \times 100(nm^2)$ . . . . .	77
3.8	Variation du signal transmis en fonction de la position de la sonde par rapport à l'objet pour différentes valeurs de $g$ , la sonde retenue correspond à la forme (2). . . . .	78
3.9	Variation du signal pour différentes valeurs de: (a) l'indice de réfraction de l'objet $n_{1ob}$ , (b) indice de réfraction de la sonde $n_p$ . . . . .	79
3.10	Variation du signal transmis pour différentes valeur d'angle d'incidence $\theta$ . En (b) et (c) nous présentons un agrandissement de l'évolution des flux pour $\theta = 10^\circ$ et $\theta = 80^\circ$ . . . . .	81
3.11	Les hypothèses de calculs de la fonction de transfert du PSTM. $H_{sonde}$ est la fonction spectrale de la sonde, $H_{obj}$ présente la réponse de l'objet à une onde plane incidente. . . . .	82
3.12	Echantillons considérés dans les calculs: (1) $a = \lambda/5$ , $b = \lambda/20$ et $n = 1.458$ (2) $a = \lambda/20$ , $b = \lambda/5$ et $n = 1.458$ , (3) $a = \lambda/20$ , $b = \lambda/20$ et $n = 2.25$ . . .	83
3.13	Calcul des fonction de transfert pour les objets de la Fig. 3.12: (a) Nos résultats. (b) Résultats obtenus par Carminati [Carminati et Greffet 95b, Greffet 89]. . . . .	84
3.14	Fonction de transfert calculée pour différentes valeurs de distance sonde-objet $g$ et pour une sonde de forme 2 (a) objet de taille $100 \times 100(nm^2)$ , (b) objet de taille $10 \times 10(nm^2)$ . . . . .	85
3.15	Fonctions de transfert de la sonde calculée pour différentes formes d'apex et pour deux distances sonde-objet: (a) $g = 10nm$ et (b) $g = 100nm$ . . . . .	86
4.1	Propagation d'un rayon lumineux dans un guide planaire à trois couches. .	90
4.2	Les signaux transmis par les différentes sondes avec et sans absorbant. $D = 4\mu m$ , $a_3 = 100nm$ . Seul $\varphi$ varie: $10^\circ$ , $20^\circ$ et $30^\circ$ . . . . .	95
4.3	Signal transmis par différentes sondes de diamètre $D = 4\mu m$ mais dont les paramètres d'apex et de taper varient. . . . .	97
4.4	Flux total et les flux partiels relatifs aux modes propres d'ordre 2, 1 et 0. La sonde est de diamètre $D = 4\mu m$ et possède 14 modes propres. (a) $a_3 = 10nm$ , (b) $a_3 = 50nm$ et (c) $a_3 = 100nm$ . $\phi = 10^\circ$ . . . . .	98
4.5	Diagramme de diffusion de l'objet et profil des perturbations dues aux sondes de diamètre $D = 4\mu m$ , $\varphi=10^\circ$ , $\varphi=20^\circ$ et $\varphi=30^\circ$ . . . . .	99

4.6	Signal transmis à travers une sonde de diamètre $D = 4\mu m$ , $\varphi=30^\circ$ et d'apex $a_3 = 50nm$ pour différentes tailles de l'objet (La distance sonde-objet est constante $g = 10nm$ , ce qui implique la variation de la distance sonde-substrat). . . . .	101
4.7	Signal transmis à travers une sonde de diamètre $D = 10\mu m$ en comparaison avec le signal collecté dans les mêmes conditions par une sonde de diamètre $D = 4\mu m$ et de même géométrie de sonde. . . . .	102
4.8	Signal transmis à travers une sonde de diamètre $D = 25\mu m$ de différents tailles d'apex et $\varphi=10^\circ$ . . . . .	103
4.9	Signal transmis à travers une sonde de diamètre $D = 25\mu m$ , d'apex $a_3 = 50nm$ et $\varphi=10^\circ$ . La période est $d = 120\mu m$ et le nombre de modes $2N+1 = 1281$ . . . . .	104
5.1	Schéma des sondes structurées . . . . .	108
5.2	Signal collecté par une sonde multimode non structurée de diamètre $D = 25\mu m$ , de cône d'angle $\varphi=30^\circ$ , d'apex $a_3 = 50nm$ . Les calculs sont effectués dans les deux situations : avec et sans absorbant entre la zone modulée et la zone homogène. . . . .	109
5.3	Signal collecté par des sondes monomodes structurées : comparaison entre sonde métallisée et non-métallisée. Le diamètre des sondes est $D = 25\mu m$ , le taper est d'angle $\varphi=30^\circ$ et d'apex $a_3 = 50nm$ . Le coeur est de diamètre $d_c = 600nm$ et d'indice de réfraction $n_c = 1.508$ . Le métal est l'or d'épaisseur $e_m = 100nm$ et d'indice de réfraction $n_m = 0.1829+j3.0894$ . Nous présentons dans l'insert l'agrandissement de l'évolution du pic central. . . . .	110
5.4	Signal collecté par des sondes multimodes structurées : comparaison entre des sondes métallisée et non-métallisées. $D = 25\mu m$ , $\varphi=30^\circ$ et $a_3 = 50nm$ . Le coeur est de diamètre $d_c = 10\mu m$ et d'indice de réfraction $n_c = 1.508$ . Le métal est l'or d'épaisseur $e_m = 100nm$ et d'indice de réfraction $n_m = 0.1829+j3.0894$ . Nous présentons dans l'insert l'agrandissement de l'évolution du pic central. . . . .	112
5.5	(a) Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde multimode attaquée chimiquement non métallisée dans le mode à intensité constante. L'objet est en silice de $50nm$ de large et $20nm$ de hauteur. (b) Coupe horizontale effectuée sur l'image optique. . . . .	114
5.6	(a) Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde monomode étirée non métallisée dans le mode à intensité constante, l'objet est de taille $50 \times 20(nm^2)$ . (b) Coupe horizontale effectuée sur l'image optique. . . . .	115
5.7	Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde monomode étirée métallisée dans le mode à intensité constante, l'objet est de taille $50 \times 20(nm^2)$ . (b) Coupe horizontale effectuée sur l'image optique. . . . .	116

5.8	Signal transmis par la sonde multimode non métallisée en mode à hauteur constante. L'objet est de taille $50 \times 20(nm^2)$ et la distance sonde-objet est $g = 50nm$ . . . . .	117
5.9	Signal transmis par les deux sondes monomodes : métallisée et non métallisée, le balayage est effectué en mode à hauteur constante, l'objet est de taille $50 \times 20(nm^2)$ . La distance sonde-objet est $g = 50nm$ et les caractéristiques géométriques et optiques des sondes sont identiques. La couche d'or autour de la sonde a pour épaisseur $100nm$ . . . . .	118
6.1	Schéma du dispositif: $n_1 = 4$ est l'indice de réfraction du prisme, $n_{1a} = 1.7$ est l'indice de réfraction de l'échantillon, $n_{1b}$ est l'indice de réfraction de l'objet absorbant encastré, $n_2 = 1$ est l'indice de réfraction de l'air. $d$ est la période du système, $s$ est la taille latérale de l'objet absorbant, $e$ est son épaisseur. $\theta$ est l'angle d'incidence. La sonde est modélisée par un guide planaire rectangulaire qui se termine par une partie conique et un apex. Son indice de réfraction est $n_{1p} = 2.4$ . . . . .	123
6.2	Variation des parties réelle et imaginaire de l'objet absorbant, en fonction de la longueur d'onde . . . . .	124
6.3	Intensité du champ proche en fonction de la position latérale de la sonde par rapport à l'objet, pour différentes épaisseurs de l'objet absorbant. . . .	125
6.4	Intensité du champ proche en fonction de l'épaisseur de l'objet absorbant. Les valeur des épaisseurs de la Fig.6.3 sont précisée par des petits carrés. .	126
6.5	Carte de spectroscopie de l'objet absorbant calculée à une distance de $y_0 = 10nm$ , pour $\lambda_0 = 5\mu m$ et $\theta = 16^\circ$ , l'objet est $1.2\mu m$ de long sur $5\mu m$ de large. . . . .	127
6.6	Cartes de spectroscopie de l'objet absorbant calculées à différentes distances de l'échantillon $y_0$ , pour $\lambda_0 = 5\mu m$ et $\theta = 16^\circ$ . L'objet absorbant est de $5\mu m$ de large et $1.2\mu m$ d'épaisseur. La sonde n'est pas prise en compte.	128
6.7	(a) Flux transmis dans la sonde. (b) Distribution de l'intensité du champ électrique en l'absence de la sonde. $\lambda_0 = 5\mu m$ et $\theta = 16^\circ$ , l'objet absorbant est de dimension de $5\mu m$ de large et de $1.2\mu m$ d'épaisseur. . . . .	130
6.8	Carte de spectroscopie de l'objet absorbant calculée en tenant compte de la présence de la sonde à une distances $y_0 = 10nm$ , pour $\lambda_0 = 5\mu m$ et $\theta = 16^\circ$ , l'objet absorbant est de $5\mu m$ de large et $1.2\mu m$ d'épaisseur. La sonde de chalcogénure est de diamètre $D = 4\mu m$ , d'angle $\varphi = 30^\circ$ et rayon d'apex $a_3 = 50nm$ , son indice de réfraction est $n_{1p} = 2.4$ . . . . .	131

# Liste des tableaux

2.1	Le coefficient d'efficacité en transmission pour les deux périodes $d_1 = 24\mu m$ et $d_2 = 48\mu m$ pour différentes valeurs de $2N + 1$ . . . . .	62
4.1	Répartition du flux transmis à travers la sonde par les différents modes propres possibles (Pour une sonde d'apex $50nm$ , d'angle $\phi = 10^\circ$ et le diamètre $D$ varie). . . . .	93
4.2	Répartition du flux transmis à travers la sonde par les différents modes propres possible (Pour une sonde d'apex $10nm$ , d'angle $\phi = 10^\circ$ et le diamètre $D$ varie). . . . .	94



# Introduction

Dans les trente dernières années un domaine de la physique expérimentale a connu une très rapide évolution: il s'agit de celui des microscopies. L'apparition des microscopies à sonde locale a en effet permis de franchir un saut important dans de nombreux domaines de la recherche fondamentale ou appliquée:

- La physique du solide et la physique des surfaces ont mis à profit les possibilités de localiser les atomes et de sonder de façon fine les densités électroniques.
- Les manipulations d'atomes ont ouvert la voie à la réalisation de nano-objets en particulier dans le champ de l'électronique.
- L'optique a dépassé la limite classique de résolution des systèmes et ouvert la voie à une nano-optique (cristaux photoniques, maîtrise des plasmons, nano-opto-électronique, optique quantique, etc ...).
- La biologie s'ouvre aux applications variées de l'observation à l'échelle nanométrique (nanocapteurs, puces ADN-silicium, manipulations et encapsulage de molécules, etc...).

En optique, le principe de la microscopie de champ proche apparaît dans un article de Synge en 1928: il propose de déplacer une ouverture microscopique pour réaliser un système à résolution supérieure à la limite de diffraction d'Abbe [Synge 28]. La difficulté à construire de tels systèmes retarde leur apparition. Dans le domaine des micro-ondes les travaux de Ash et Nicholls rapportèrent en 1972 les premières réalisations expérimentales fiables [Ash et Nicholls 72]. Dans les années 1980 la microscopie tunnel électronique (STM) apporte la maîtrise des déplacements contrôlés en 3D à l'échelle nanométrique [Binnig et Rohrer 84]. C'est à cette époque que sont réalisés les premiers microscopes de champ proche tels que nous les connaissons aujourd'hui [Courjon *et al.* 89, Goudonnet *et al.* 95]. Les travaux du groupe d'optique de champ proche du Laboratoire de Physique de l'université de Bourgogne se poursuivent depuis cette époque avec la volonté de comprendre, à partir de leur modélisation, les mécanismes de formation des images dans le microscope à effet tunnel photonique (PSTM, Photon Scanning Tunneling Microscope) [Salomon 91] et de caractériser les influences liées aux paramètres caractéristiques du système.

En fait il s'agit de modéliser le système échantillon-sonde pour étudier l'interaction entre le champ électromagnétique diffusé par l'objet et la sonde qui, point après point,



vient "mesurer" l'intensité associée à ce champ. Ceci nous guide dans la définition du problème que nous cherchons à résoudre: trouver une méthode pertinente et sûre pour calculer la répartition du champ électromagnétique associée à un objet de taille généralement sub-longueur d'onde, éclairé par une onde plane monochromatique. Il faut introduire ensuite une sonde mobile à hauteur constante au dessus de l'objet et trouver le moyen de calculer le champ transmis par la sonde. Le problème ici est de prendre en compte à la fois des sondes réalistes par rapport aux situations expérimentales et les interactions liées au système sonde-objet dans le champ électromagnétique présent (diffusions multiples) et calculer enfin le signal transporté à la sortie du système.

Nous avons mis l'accent dans ce travail sur l'influence de la sonde en choisissant des tailles et des caractéristiques optiques comparables aux différents types de fibres optiques réellement utilisées dans les manipulations. Nous avons dans la ligne des travaux antérieurs du groupe [Salomon 91, Salomon 92, Salomon *et al.* 00, Gérard 04] choisi de travailler avec un modèle bidimensionnel (2D) et global (c'est-à-dire prenant en compte toutes les interactions du système et son environnement). Ce choix tient compte à la fois de savoir-faire du groupe et des possibilités de comparer nos résultats avec d'autres auteurs. Nous avons aussi cherché à améliorer le modèle par rapport au calcul perturbatif développé par *Van Labeke* [VanLabeke et Barchiesi 93, VanLabeke *et al.* 95], en utilisant un calcul rigoureux du champ grâce aux algorithmes matriciels. Nous avons de la même façon soigné la prise en compte de la forme, de la nature et de la taille de la sonde par rapport aux modèles antérieurs [Christenssen 95, Kann *et al.* 95a], ou pour le cas du SNOM [Novotny *et al.* 95]. Contrairement aux travaux de *Bozhevolnyi* [Bozhevolnyi et Bozhevolnaya 94, Bozhevolnyi *et al.* 95] et *Castiaux* [Castiaux *et al.* 94] nous sommes capables de décrire le couplage entre le champ électromagnétique diffusé en présence de l'objet et les modes propres de la sonde, nous rapprochant ainsi des travaux de Tanaka [Tanaka *et al.* 98b].

Ces différentes considérations permettent de définir l'état de l'art du problème et nous les avons développé dans le *chapitre 1*. Le modèle global élaboré pour cette étude est exposé dans le *chapitre 2*. Il s'applique à la formation des images dans un système PSTM et prend en compte le couplage sonde-échantillon sans faire d'approximation sur la forme, la taille, la nature de la sonde et la distance sonde-échantillon. Nous y présenterons aussi de façon détaillée les algorithmes développés et les critères de convergence retenus pour juger de la pertinence des résultats numériques. Dans le *chapitre 3*, nous présentons les résultats obtenus lorsque l'on utilise des sondes monomodes: les points importants sont l'évolution du couplage entre le champ "détecté" par la sonde et le mode guidé et le lien entre le champ collecté et la structure de l'objet. En effet, si différents travaux [Girard et Courjon 90, Girard et Dereux 96] ont établi que le signal collecté est proportionnel à l'intensité associée au champ au point où est localisée la sonde, il n'y a pas de raison d'exclure le fait que différentes composantes du champ puissent avoir des coefficients de couplage différents

avec les modes propres des sondes. Le *chapitre 4* reprend d'ailleurs ces études dans le cas d'une sonde multimode. Dans ces deux chapitres, nous nous sommes attachés à caractériser l'influence des paramètres physiques caractéristiques du système. Enfin dans le *chapitre 5*, le modèle est appliqué aux cas des sondes structurées possédant une gaine, un cœur et éventuellement un revêtement métallique. Des comparaisons qualitatives avec des résultats expérimentaux antérieurs obtenus dans le groupe permettent d'établir la pertinence de notre modèle pour l'étude des sondes réalistes. Le *chapitre 6* est issu d'une collaboration avec un groupe d'expérimentateurs du Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnétique (LURE d'Orsay) et il montre la possibilité d'appliquer notre modèle pour la simulation d'images spectroscopiques dans le domaine infrarouge.

Nous verrons en conclusion que ce travail ouvre des perspectives intéressantes, notamment sur le problème de la fonction de transfert et la question de la passivité (ou non) des sondes dans le PSTM, problème qui reste sans réponse définitive aujourd'hui.



# Chapitre 1

## Etat de l'art

Après une introduction sur les notions de champ lointain et de champ proche, nous présentons dans ce chapitre différentes notions fondamentales liées aux travaux de cette thèse. Nous abordons tout d'abord la définition du champ proche et des ondes évanescentes. Ensuite nous détaillons la problématique principale de la thèse qui est la formation d'une image optique dans la configuration dite Microscope à Effet Tunnel Photonique ou Photon Scanning Tunneling Microscope (PSTM). A partir d'un modèle analytique simple de Born, nous allons définir différents aspects et différentes grandeurs physiques susceptibles de nous aider à comprendre la formation d'une image optique. Les notions de fonction de transfert et résolution en champ proche sont aussi abordées. La dernière partie, sera consacrée aux différentes approches et modèles théoriques utilisés dans l'étude de champ proche : en particulier, nous nous intéressons à la configuration PSTM.

### 1.1 Considérations générales sur le champ proche optique

#### 1.1.1 Champ lointain

La microscopie optique conventionnelle ou en champ lointain est liée à la détection d'ondes progressives à une distance de l'objet très supérieure à la longueur d'onde. C'est la technique de visualisation la plus ancienne et la plus utilisée malgré l'apparition des microscopies ultra-résolvantes comme la microscopie électronique et les microscopies à sonde locale (STM, SNOM, AFM...etc). Ceci est dû à ses nombreux avantages : sa simplicité d'utilisation, son caractère non destructif ainsi que ses apports dans le domaine de la spectroscopie. Cette technique a permis d'étudier une large variété d'échantillons sous divers environnements. Malheureusement, la résolution latérale est fondamentalement limitée par la diffraction en champ lointain, environ la demi-longueur d'onde de la lumière incidente  $\lambda/2$  (en pratique de l'ordre de  $0.5\mu m$ ). Pour vaincre cette limite, la microscopie

en champ proche fut pensée il y a près d'un siècle. Cette nouvelle approche microscopique à donné naissance à plusieurs techniques d'imagerie et à divers montages expérimentaux. La divergence de vue de la communauté scientifique sur la nature exacte des phénomènes qui génèrent les images optiques en champ proche a conduit à une diversité de configurations, ce qui montre l'inexistence d'une configuration universelle valable pour toutes les applications. Dans ce qui suit nous allons d'abord présenter la limitation de résolution des systèmes classiques, puis les moyens de dépasser cette limite en utilisant la microscopie optique en champ proche [Born et Wolf 93].

### 1.1.2 Champ proche

Dans le but d'introduire les différentes notions telles que : champ proche, onde évanescente et résolution des systèmes, nous allons aborder les notions fondamentales nécessaires à la description du champ proche. Pour cela, nous considérons un objet (voir Fig.1.1) délimité par une interface dont le profil est  $z = S(x, y)$ , éclairé par une source monochromatique de pulsation  $\omega$  et de longueur d'onde correspondante  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ . Nous allons analyser le champ à proximité de la surface (ou champ proche) pour montrer qu'outre les termes propagatifs il comporte aussi une contribution non radiative (ondes évanescentes) confinée à l'immédiat voisinage de la surface.

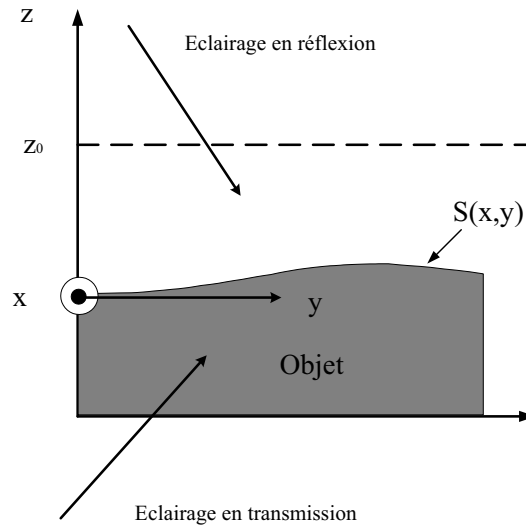


FIG. 1.1: Définition de la zone champ proche par un objet éclairé en réflexion ou en transmission. La surface de l'objet est définie par  $z = S(x, y)$ .

Résoudre le problème de propagation d'une onde nécessite la recherche de l'expression explicite du champ électrique dans tout l'espace où se propage cette onde, donc nécessite

la résolution des équations de Maxwell. La décomposition de Fourier du champ  $E(x, y)$  qui se propage dans le plan  $z$  fixe, peut être écrite de la manière suivante:

$$E(x, y, z) = \int \int \tilde{E}(u, v, z) \exp[(i(ux + vy))] dudv \quad (1.1)$$

où  $u$  et  $v$  sont des réels.

Ceci ramène la recherche de  $E(x, y, z)$  à la recherche de sa transformée de Fourier, par conséquent une équation de propagation de la forme:

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}(u, v, z)}{\partial z^2} + \left( \frac{\omega^2}{c^2} - u^2 - v^2 \right) \tilde{E}(u, v, z) = 0 \quad (1.2)$$

En posant:

$$w = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - u^2 - v^2} \text{ pour } \frac{\omega^2}{c^2} \succ u^2 + v^2 \quad (1.3)$$

$$w = \sqrt{u^2 + v^2 - \frac{\omega^2}{c^2}} \text{ pour } \frac{\omega^2}{c^2} \prec u^2 + v^2 \quad (1.4)$$

la solution générale de (1.2) prend la forme suivante:

$$\tilde{E}(u, v, z) = A(u, v) \exp(iwz) + B(u, v) \exp(-iwz) \quad (1.5)$$

Si on considère que le champ se propage dans le sens des  $z \succ 0$  alors  $B = 0$ . Donc  $A$  peut être déterminé en écrivant l'expression du champ dans le plan  $z = 0$  à l'aide de (1.1) et (1.3), on obtient:

$$E(x, y, 0) = \int \int A(u, v) \exp[(i(ux + vy))] dudv \quad (1.6)$$

Donc  $A(u, v) = \tilde{E}(u, v, 0)$

Et finalement le champ en un point  $(x, y, z)$  s'écrit sous la forme :

$$E(x, y, z) = \int \int \tilde{E}(u, v, 0) \exp[(i(ux + vy))] dudv \quad (1.7)$$

Sous cette forme, le champ est une superposition d'ondes planes. Cette équation montre que l'amplitude complexe de chaque onde plane peut être donnée par la transformée de Fourier du champ dans le plan  $(x, y)$ . Cette équation, appelée aussi spectre angulaire du champ est valable également en champ proche. Par une formule d'inversion nous obtenons l'expression suivante :

$$\tilde{E}(u, v, 0) = \frac{1}{4\pi^2} \int \int E(x, y, 0) \exp[(-i(ux + vy))] dx dy \quad (1.8)$$

A partir de cette équation, on obtient les amplitudes des ondes planes dont le vecteur d'onde a pour composantes  $(u, v)$ . Ceci revient à voir la propagation comme un analyseur de spectre dans le sens où l'amplitude d'une onde plane se propageant dans la direction  $(u, v, w)$  est proportionnelle à la transformée de Fourier du champ dans le plan  $z = 0$ .

La notion de fréquence spatiale est très importante dans l'étude en champ proche. En effet, une fréquence spatiale du champ dans le plan  $z = 0$ , d'amplitude  $\tilde{E}(u, v, 0)$  correspond à une direction de propagation caractérisée par le vecteur d'onde de coordonnées  $(u, v, w)$ , et à chaque direction correspond un point de l'image formée. La répartition de l'intensité lumineuse est proportionnelle au carré du champ soit à  $\left| \tilde{E}(u, v, 0) \right|^2$ .

Au travers de ces considérations de base, l'aspect que joue la propagation comme analyseur de spectre est très intéressant dans la définition de la résolution du champ proche. En effet, il est impossible d'associer une direction de propagation à une fréquence spatiale supérieure à  $\frac{\omega}{c}$ , ce qui correspond à des fréquences spatiales dont le vecteur d'onde  $w$  est imaginaire pur et donc à des ondes ayant une décroissance exponentielle suivant  $z$ . Au delà de quelques longueurs d'onde, leur contribution au champ devient négligeable, ce sont les ondes évanescentes. Par conséquent, seules les ondes dont la composante du vecteur d'onde suivant  $z$  est réel, se propagent se sont les ondes radiatives. La fréquence maximale dans le plan  $(x, y)$  correspondant à une onde propagative est donc  $\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

En d'autres termes, les détails fins de la structure qui sont plus petits que la longueur d'onde sont perdus lors de la propagation. L'idée de l'optique de champ proche est de dépasser cette limite et d'aller chercher l'information là où elle se trouve, très près de la structure étudiée. Il faut placer un détecteur sensible aux ondes évanescentes dans l'immédiate proximité de la surface où les fréquences spatiales élevées sont accessibles.

Une caractéristique des ondes évanescentes est leur décroissance rapide perpendiculairement à la surface de l'échantillon, de telle sorte qu'elles n'existent que dans le voisinage immédiat de la surface de l'échantillon. Cette zone est appelée zone de champ proche de l'échantillon et c'est ici que réside l'explication de la limite en résolution des microscopes classiques. En effet dans ces appareils, seule la composante propagative contenant les informations sur les basses fréquences spatiales de l'échantillon est collectée à des distances de l'échantillon très supérieure à  $\lambda$ . L'information sur les hautes fréquences spatiales de l'objet, contenue dans les ondes évanescentes, reste confinée dans la zone de champ proche [Wolf et Nieto-Vespirinas 85], elle n'est pas prise en considération en microscopie classique.

Cette formulation suggère une première règle: pour assurer la détection d'un objet de dimension sublongueur d'onde avec une résolution  $d$ , la distance sonde-échantillon doit être inférieure à  $d/2\pi$ , ce qui définit l'extension du champ proche optique de l'objet considéré.

## 1.2 Différents types de microscopes optiques en champ proche

La microscopie en champ proche est fondée sur la détection des ondes évanescentes confinées dans la zone champ proche de l'échantillon. Cette détection peut se faire de plusieurs manières [Courjon et Bainier 94], ce qui a donné naissance à un grand nombre de configurations expérimentales. Plusieurs classifications [Pohl et Courjon 93, Pohl 92], ont été proposées, celles basées sur la nature de l'éclairage de l'échantillon (transmission ou réflexion) ou bien sur le rôle de la sonde pour collecter ou éclairer l'échantillon (mode illumination, mode collection et perturbation). Du fait que le sujet principal de cette thèse est l'effet de la sonde dans la formation des images optiques, nous allons décrire rapidement les différentes configurations possibles en les classant selon le fait que la sonde est avec ouverture ou sans ouverture (sonde dite "aperturless").

### 1.2.1 Sondes avec ouverture

Nous regroupons dans cette catégorie, les deux techniques du SNOM en mode illumination et en mode collection.

#### 1.2.1.1 SNOM en mode illumination

Le principe des premiers microscopes optiques en champ proche rejoint la suggestion que fit *E. H. Synge* en 1928 [Synge 28], qui propose d'utiliser une petite ouverture de diamètre nanométrique dans un écran métallique éclairé et placé à quelque nanomètres de la surface de l'échantillon. De cette façon, le champ transmis au travers de l'échantillon est détecté au loin et contient des informations sur le coefficient de transmission optique de l'échantillon avec une résolution submicronique (voir Fig.1.2(a)). Dans ce principe, deux paramètres sont importants : le diamètre de l'ouverture et la distance entre l'écran et l'échantillon, ce sont eux qui déterminent la résolution. Le rôle de l'écran métallique est de confiner la lumière en une tache de diamètre à peu près égal à celui de l'ouverture, qui joue le rôle d'une nano-source optique qui éclaire localement l'échantillon. Si la distance objet-écran dépasse quelques centaines de nanomètres, la diffraction joue son rôle de filtre passe-bas, et l'échantillon voit une source lumineuse de taille supérieure au micron. Il faut donc approcher l'échantillon et le placer dans le champ proche de l'ouverture, cette dernière diffractant essentiellement la lumière sous forme d'ondes évanescentes du fait de sa taille nanométrique. En 1984, *Pohl et al* et *Durig et al* démontrèrent qu'une résolution de  $\lambda/20$  était possible avec une pointe de quartz recouverte d'aluminium [Pohl *et al.* 84, Durig *et al.* 84]. Une petite ouverture pouvait être formée au bout de la pointe par contact avec l'échantillon. La lumière couplée dans la partie supérieure de la pointe s'échappait alors par l'ouverture, qui déplacée à quelques nanomètres de la surface jouait le rôle de nano-source. Parallèlement, *Lewis*



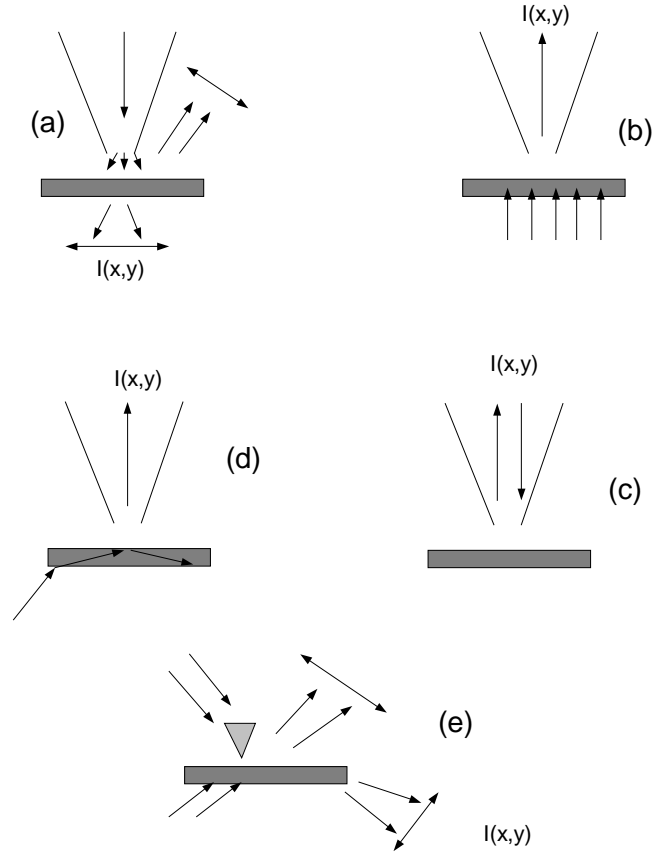


FIG. 1.2: Les différentes techniques de microscopie en champ proche : (a) SNOM en mode illumination. (b) SNOM en mode collection. (c) SNOM en réflexion interne. (d) Microscopies à effet tunnel optique (PSTM). (e) Pointe diffusante placée dans le champ proche. Dans chaque cas  $I(x,y)$  représente le signal collecté en champ proche pour former l'image.

*et al* [Lewis *et al.* 84] et *Fischer et al* [Fischer 86] utilisèrent des ouvertures pratiquées dans des écrans plans, mais ces méthodes ne permettaient d'observer que les échantillons pratiquement lisses ou convexes du fait de l'impossibilité pour l'écran de suivre une topographie plus complexe de la surface [Lewis *et al.* 84, Fischer 86]. En 1986, *Betzig et al* réalisaient une avancée importante [Betzig et A. Lewis 86], en utilisant des sondes métallisées (micro-pipettes). *Betzig et al* ont pu montrer que le moyen le plus efficace d'obtenir une source très localisée tout en conservant un niveau convenable de signal transmis est d'utiliser une fibre optique métallisée [Betzig et Chichester 93, Trautman *et al.* 94]. La deuxième avancée concerne le contrôle de la distance pointe-échantillon, un contrôle

par des forces de cisaillement entre la pointe et la surface (mode de *shear-force*), a été réalisé simultanément par deux groupes [Betzig et Trautman 92, Toldeo-Crow *et al.* 92]. La technique de *shear-force* [Berguiga 01] qui consiste à exciter des modes de vibration dans la pointe à une fréquence de résonance mécanique, permet de mesurer l'amplitude de vibration. L'amplitude de vibration est réduite quand la pointe s'approche de la surface à cause des forces de cisaillement (d'une portée de quelques nanomètres). La distance pointe-échantillon est asservie en gardant l'amplitude de vibration constante. Il est même possible d'enregistrer simultanément les images optiques (le signal de la lumière diffusée) et les mouvements de la pointe (image *shear-force*). Cette seconde image fournit la topographie de la surface de l'échantillon. D'autres améliorations ont été réalisées en utilisant des microscopes à force atomique (AFM [Hulst *et al.* 93] où des pointes tétraédriques [Fischer 93] ont obtenu ainsi une résolution expérimentale de 6 nm [Koglin *et al.* 96]. D'autres versions de SNOM en mode illumination ont été décrites par Hecht *et al.* [Hecht *et al.* 95, Hecht *et al.* 00, André *et al.* 00] comme par exemple le TNOM (Tunneling Near-field Optical Microscope) ou le ISTOM (inverted Scanning Optical Microscope).

### 1.2.1.2 SNOM en mode collection

Nous regroupons dans cette deuxième catégorie (Fig 2(b)) les techniques dans lesquelles une pointe ou une ouverture de taille sub-longueur d'onde vient détecter le champ proche diffusé par l'échantillon éclairé par une source étendue. Le champ proche est couplé avec un mode guidé dans la partie supérieure de la sonde (fibre optique monomode ou multimode). On parle de SNOM en mode collection, inventé en 1987 par Betzig *et al.* [Betzig *et al.* 87]. Cette équipe proposa d'utiliser l'ouverture nanométrique non pas pour l'illumination de l'échantillon mais comme détecteur dont le rôle est de collecter, localement et à une distance très faible de l'objet ( $\ll \lambda$ ) le champ proche diffracté par l'échantillon avant que la propagation puisse jouer son rôle de filtre passe-bas pour les fréquences spatiales de l'échantillon. Dans cette expérience, fonctionnant en transmission, l'illumination se fait à l'aide d'un objectif conventionnel de microscope et le champ collecté par la sonde est conduit à un photomultiplicateur via une fibre optique. Dans ce mode, on peut considérer que la sonde optique (l'ouverture) vient entre autre perturber localement les ondes évanescentes générées par les hautes fréquences spatiales de l'objet et porteuses des informations recherchées, pour les transformer en ondes progressives et détectables en champ lointain.

### 1.2.1.3 SNOM en réflexion

Le SNOM en réflexion est le mélange des techniques de SNOM en collection et illumination, il permet d'éclairer localement et de faire la détection en champ proche. Ce microscope fut réalisé la première fois, par Fischer *et al.* en 1988 [Fischer *et al.* 88]: la source et la sonde détectrice sont en une seule ouverture dans un écran plan ( Fig.2

(d)). Une configuration similaire, dans laquelle l'ouverture est remplacée par une protrusion a été utilisée pour visualiser les résonances plasmons de particules métalliques [Fischer *et al.* 89]. Un autre développement été proposé ensuite par Courjon et Spajer [Courjon *et al.* 90, Spajer *et al.* 91] en s'inspirant du PSTM/SNOM. Bozhevolnyi *et al.* ont tenté de corrélés des images de *shear-force* et des images en SNOM en réflexion [Bozhevolnyi *et al.* 94]. Ils ont montré la possibilité d'enregistrer des images en illumination détectée en polarisations croisées [Bozhevolnyi *et al.* 95]. Cette configuration permet d'observer les échantillons opaques. La résolution est ainsi améliorée puisque à la fois l'éclairage et la détection ont lieu en champ proche. Mais, il semble que cette résolution soit limitée par des contraintes comme l'effet du bruit, ce qui rend la distinction entre la lumière réfléchiée à l'intérieur de la sonde et celle réfléchiée par la surface de l'échantillon très difficile.

#### 1.2.1.4 Microscopies à effet tunnel optique (PSTM)

En 1989, le microscope à effet tunnel optique (Photon Scanning Tunneling Microscope ou PSTM) a été imaginé et développé indépendamment par trois équipes : aux USA [Reddick *et al.* 89], à Dijon [de Fornel *et al.* 89] et à Besançon [Courjon *et al.* 89]. Du fait de la réflexion totale interne, le champ éclairant l'échantillon est évanescent et de ce fait la partie intéressante du signal collecté par la pointe dépend exponentiellement de la distance pointe-échantillon (Fig.2(c)). La collection des ondes évanescentes diffusées procure une image optique avec une résolution sub-longueur d'onde. Ainsi le PSTM n'est pas fondamentalement différent du SNOM en collection. C'est plutôt en pratique que des différences apparaissent. Par exemple l'approche de la pointe en PSTM peut être contrôlée en utilisant la variation exponentielle de l'onde évanescente. De plus, des pointes métallisées ont été utilisées en SNOM en collection, alors que le PSTM utilisait des pointes non métallisées.

#### 1.2.2 Microscopies à pointes sans ouverture (ou "Aperturless")

D'autres techniques ont été développées au milieu des années 90, elles consistent à éclairer un échantillon en champ lointain et placer dans son proche environnement un diffuseur de taille sub-longueur d'onde (une sonde perturbatrice) (Fig.2(e)). Dans cette configuration, la sonde n'a ni le rôle de collecteur de lumière ni le rôle de source qui éclaire l'échantillon. Elle convertit une partie des ondes évanescentes en ondes propagatives collectées à leur tour en champ lointain. La différence de cette technique par rapport au PSTM ou au SNOM en collection est la non existence de couplage avec un mode guidé dans la sonde détectrice. La sonde peut être du type métallique comme celle utilisée dans le montage STM [Zenhausen *et al.* 94, Inouye et Kawata 94, Bachelot *et al.* 95]. D'autres auteurs proposent de travailler avec des pointes diélectriques du type pointe AFM [Hulst *et al.* 93, Baida *et al.* 95]. Des résultats satisfaisants ont été obtenus avec

cette technique [Fillard *et al.* 95, Bachelot 96] notamment une résolution de l'ordre du nanomètre, mais la compréhension des mécanismes physiques liés à la détection du champ reste encore à élucider [Kawata *et al.* 94, Castagne *et al.* 95].

## 1.3 Rôle de la sonde dans la formation des images optiques

### 1.3.1 Modèle analytique pour le PSTM

Il est bien connu que la sonde est l'élément décisif en microscopie optique de champ proche aussi bien pour la détection que pour la résolution. Différents travaux entrepris dans ce domaine ont tenté de modéliser le système en tenant compte de l'interaction sonde-échantillon. Avant de présenter ces différents travaux théoriques, nous allons aborder l'idée de base de cette thèse à partir d'un modèle analytique simple, reposant sur l'approximation de Born [Carminati et Greffet 95a], [Courjon et Bainier 01, chapitre 3].

Nous avons choisi d'utiliser la notation de Van Labeke dans le chapitre 3 de la référence [Courjon et Bainier 01].

Sur la Fig.1.3, nous présentons un schéma 2D du principe du PSTM. L'objet est déposé sur un prisme et éclairé en transmission. La sonde est utilisée en mode de collection à hauteur constante. L'image optique enregistrée présente le signal détecté en fonction de la position de la sonde par rapport à l'objet.

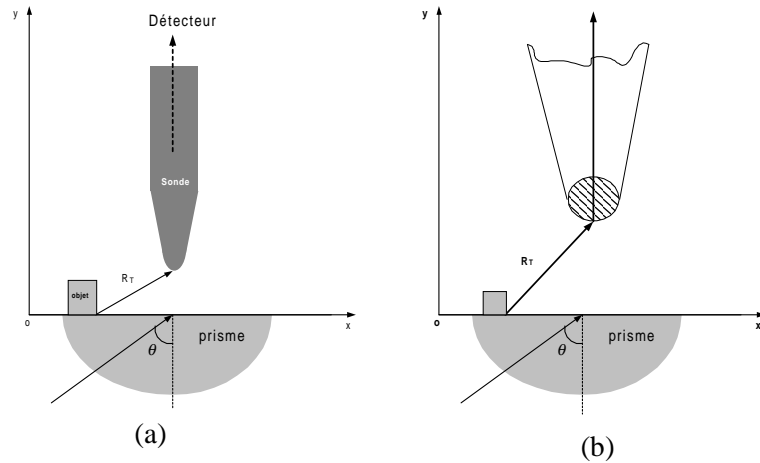


FIG. 1.3: (a) Principe du 2D-PSTM. (b) Approximation dipolaire du 2D-PSTM

Dans ce modèle, le champ diffracté au niveau de la sonde s'écrit sous la forme:

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{R}_T) = \mathbf{E}_2^{(0)}(\mathbf{R}_T) + \mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{R}_T) \quad (1.9)$$

Où  $\mathbf{R}_T$  présente la position de l'apex de la sonde par rapport à l'objet. Un dipôle électrique est induit par le champ proche de l'objet. Ce dipôle rayonne dans la partie conique de la sonde.

Dans cette approximation, il est admis, que le signal est proportionnel au module carré du dipôle induit, donc proportionnel au module carré du champ proche à la position de l'apex de la sonde.  $\mathbf{E}_2^{(0)}(\mathbf{R}_T)$  est le champ transmis par une interface plane (en absence de l'objet), et il peut être exprimé sous la forme:

$$\mathbf{E}_2^{(0)}(\mathbf{R}_T) = T(\mathbf{q}_{inc}) \mathbf{E}_{inc} \exp \left[ i \mathbf{k}_2^+(\mathbf{q}_{inc}) \cdot \mathbf{R}_T \right] \quad (1.10)$$

$\mathbf{E}_{inc}$  présente l'amplitude du champ incident,  $\mathbf{q}_{inc}$  est la projection de son vecteur d'onde dans le plan (xz).  $\mathbf{k}_2^+$  est le vecteur d'onde de l'onde plane montante dans le milieu 2 où se trouve la sonde.  $T(\mathbf{q}_{inc})$  est le coefficient de transmission.

$\mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{R}_T)$  représente la contribution de l'objet et elle est obtenue par intégration sur tous les ordres diffractés:

$$\mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{R}_T) = \frac{1}{4\pi^2} \int \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \exp \left[ i \mathbf{k}_2^+(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_T \right] \hat{P}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{inc}) D_2(\mathbf{q}) T(\mathbf{q}_{inc}) \mathbf{E}_{inc} \right\} d\mathbf{q} \quad (1.11)$$

En effet dans cette approximation, le champ proche au dessus de l'objet est constitué de deux termes :

(1) Le champ transmis  $\mathbf{E}_2^{(0)}(\mathbf{R}_T)$  par l'interface sans relief, ce terme est indépendant du profil de la surface. Ce terme est une onde évanescente quand l'angle d'incidence est supérieur à l'angle critique ( $\theta_{inc} > \theta_c$ ).

(2) le terme  $\mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{R}_T)$  donne plus d'information sur l'objet et il inclut la transmission du champ incident puis sa diffraction,  $D_2(\mathbf{q})$ , par la rugosité de la surface,  $\hat{P}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{inc})$ , et enfin sa propagation jusqu'à la sonde.

Dans le but de discuter les différentes notions utilisées dans la discussion de la formation d'une image, il est plus facile de réécrire l'équation (1.11) en faisant apparaître le spectre de l'objet en posant  $\mathbf{q} - \mathbf{q}_{inc} \longrightarrow \mathbf{q}$  :

$$\mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{R}_T) = \frac{\exp \left[ i \mathbf{q}_{inc} \cdot \mathbf{x}_T \right]}{4\pi^2} \int \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{P}(\mathbf{q}) \exp \left[ i \mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_T \right] \Gamma(\mathbf{q}) \cdot \Phi(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \quad (1.12)$$

Cette formule montre que la transformée du champ diffracté est proportionnelle à la transformé de Fourier du profil de l'interface. Ce coefficient de proportionnalité qui est  $\Gamma(\mathbf{q}) \cdot \Phi(\mathbf{q})$  dépend du spectre des fréquences spatiales de l'objet et il est composé de deux termes de filtrage:

(1) Le filtrage de propagation est donné par :  $\Gamma(\mathbf{q}) = \exp \left[ i z_T w_2^+(\mathbf{q} + \mathbf{q}_{inc}) \right]$ , avec  $w_2^+(\mathbf{q} + \mathbf{q}_{inc}) = \sqrt{\left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 - (\mathbf{q} + \mathbf{q}_{inc})^2}$ , permet de comprendre le fonctionnement du microscope. En effet, d'après son expression, pour les basses fréquences spatiales ( $\mathbf{q} < \frac{2\pi}{\lambda}$ ),

$w_2^+$  est réel,  $P(\mathbf{q})$  est un nombre complexe de module 1 et il correspond à un déphasage. Par contre pour les hautes fréquences spatiales ( $\mathbf{q} > \frac{2\pi}{\lambda}$ ),  $w_2^+$  est imaginaire pur,  $\Gamma(\mathbf{q})$  est un nombre réel positif inférieur à 1 et correspond à une atténuation.

(2) Le filtrage de diffraction est donné par:  $\Phi(\mathbf{q}) = D_2(\mathbf{q} + \mathbf{q}_{inc})T(\mathbf{q}_{inc})\mathbf{E}_{inc}$ .

Cette analyse montre que la propagation devient indépendante du vecteur d'onde incident et donc de la longueur d'onde incidente. D'autre part, pour un objet de grande dimension par rapport à la longueur d'onde, son spectre comporte principalement des basses fréquences et le champ diffracté est constitué d'ondes planes radiatives qui peuvent être collectées en champ lointain. Autrement dit, on peut obtenir une image fortement corrélée à la structure de l'objet en champ lointain. Mais si la taille de l'objet diminue, il y a un effet de diffraction (de Fresnel), car les hautes fréquences spatiales deviennent plus importantes, ce qui déforme l'image de l'objet en champ lointain. Dans ce cas, l'essentiel du spectre correspond aux ondes évanescentes, qui ne sont détectables qu'en champ proche.

La question qu'on se pose alors sur la résolution d'un microscope est : quels sont les paramètres responsables de la limite de résolution ? En effet, beaucoup d'auteurs admettent, contrairement à la microscopie classique, qu'il n'y a pas un critère absolu de limite de résolution en optique de champ proche. Néanmoins on peut voir un tel critère, comme étant la capacité du microscope en champ proche de séparer les fréquences spatiales correspondant aux ondes évanescentes des fréquences des ondes radiatives ainsi que du bruit en fond. Différents aspects liés à la résolution seront discutés dans le paragraphe suivant consacré à la fonction de transfert.

### 1.3.2 Fonction de transfert

Cette notion est généralement abordée par différents auteurs, dans le but de compléter les études théoriques. Bien que l'idée de déterminer une fonction de transfert dans toutes les configurations ne soit pas évidente, des travaux entrepris par Bozhevolnyi ont montré l'existence d'une pseudo-fonction de transfert dans le SNOM en mode collection et en particulier dans le PSTM [Bozhevolnyi et Bozhevolnaya 99]. Plus généralement, une fonction de transfert est définie comme une caractéristique propre d'un instrument d'optique. Cette fonction dépend de toute l'optique du système, des conditions d'expériences : longueur d'onde, angle d'éclairage etc. La fonction de transfert est aussi employée en optique de champ proche [Pieralli 94] pour étudier le couplage sonde-objet dans le PSTM en mode collection et en SNOM en mode illumination [Kann *et al.* 95b]. A ce jour, il n'existe que peu de travaux théoriques [VanLabeke et Barchiesi 93] et expérimentaux [Maheswari *et al.* 96, Barchiesi 98] qui ont abordé la notion de fonction de transfert en champ proche.

Par définition, la fonction de transfert est la transformée de Fourier de la réponse impulsionnelle spatiale, elle doit être indépendante de l'objet.

Dans la plupart des configurations, il est difficile de définir une fonction de transfert, et même dans le modèle analytique de Born, des auteurs [Greffet et Carminati 97,

Carminati et Greffet 95b], parlent d'une "quasi-fonction de transfert". En effet, la transformée de Fourier de l'intensité du signal collecté est donnée par :

$$I_D(\mathbf{R}_T) = \left| \mathbf{E}_2^{(0)}(R_T) + \mathbf{E}_2^{(1)}(R_T) \right|^2 = I_D^0(\mathbf{y}_T) + 2\Re \left[ \mathbf{E}_2^{(0)}(R_T) \cdot \mathbf{E}_2^{(1)}(R_T) \right] \quad (1.13)$$

lorsque le terme de diffraction est négligé. Le premier terme  $I_D^0(\mathbf{y}_T)$  correspond à l'intensité de l'onde transmise par l'interface plane, qui contribue à un fond continu de l'image obtenue en déplaçant la sonde à une hauteur constante  $z_T$ . Le deuxième terme traduit l'interférence entre le champ diffracté par l'objet et l'onde transmise par l'interface du prisme, il contient l'amplitude et la phase du champ diffracté [Greffet *et al.* 95].

L'introduction d'une réponse impulsionnelle est possible pour deux raisons : la première est que le deuxième terme dans l'équation (1.13) est interprété comme un hologramme avec pour champ de référence  $E_2^{(0)}(R_T)$ , ce qui permet de reconstituer le profil de la surface de l'objet. La deuxième est la dépendance linéaire de ce terme en fonction du profil de la surface de l'objet. Cette réponse impulsionnelle reliant l'intensité détectée et le profil de l'objet [Barchiesi et VanLabeke 93] est alors donnée par:

$$I_D(\mathbf{R}_T) = I_D^0(\mathbf{y}_T) + \int \int_{-\infty}^{+\infty} P(\mathbf{x}_T) H(\mathbf{x}_T - x; z_T, \mathbf{q}_{inc}, \mathbf{e}_{inc}) dx \quad (1.14)$$

D'après cette équation, la fonction  $H$  est quasi-impulsionnelle car elle ne dépend pas du profil de la surface. Elle dépend de l'indice de réfraction de l'objet, de la distance sonde-objet et elle est fonction du champ incident et de sa polarisation (respectivement  $\mathbf{q}_{inc}, \mathbf{e}_{inc}$ ).

Expérimentalement, la fonction de transfert joue un rôle important dans la technique d'imagerie: non seulement elle sert à déterminer la résolution spatiale du microscope, mais elle permet d'aborder le problème inverse. En effet, en microscopie conventionnelle (champ lointain), l'amplitude du champ (pour un éclairage cohérent) ou l'intensité (éclairage incohérent) dans le plan de l'image (au dessus de la sonde) peut être liée à celle du plan de l'objet (au-dessus de la surface de l'objet) via une fonction de transfert. En champ proche optique, la complexité de l'interaction sonde-objet affecte l'invariance spatiale de détection, car le champ collecté dépend de la position de la sonde par rapport à l'objet. Ceci rend la définition d'une fonction de transfert quasiment impossible ( de même que la résolution) dans une configuration SNOM. Cependant, le fait que le couplage sonde-objet dépende uniquement de la géométrie du système, rend possible la définition d'une fonction de transfert. Nous aborderons dans notre travail, la détermination de la fonction de transfert, notamment à partir de la méthode numérique employée pour décrire l'effet de la sonde dans la formation des images optiques.

## 1.4 Modèles théoriques

Cette section est consacrée aux différents travaux théoriques, qui ont permis d'aborder la modélisation de l'effet de la sonde dans la formation d'une image optique en champ proche. Nous allons ici classer les différentes approches théoriques selon les configurations auxquelles elle s'appliquent.

### 1.4.1 Modèles théoriques pour le SNOM en mode illumination

Les premiers calculs de diffraction par des petites ouvertures dans des écrans minces parfaitement conducteurs utilisés en champ proche, remontent à *Bethe et Bouwkamp* [Bethe 44, Bouwkamp 50a, Bouwkamp 50b]. Une première description qualitative des sondes a été faite en utilisant le modèle d'ondes cylindriques [Kapany et Burke 72] où l'extrémité de la sonde était assimilée à un empilement de tubes élémentaires, ce qui a permis aussi d'évaluer la résolution des sondes en émission. En 1987, *Roberts* calcule le champ électromagnétique diffracté par une ouverture circulaire dans un plan parfaitement conducteur d'épaisseur donnée [Roberts 87]. L'étude du confinement du champ transmis en fonction de la distance à l'ouverture débute avec les travaux de *Betzig et al* [Betzig et A. Lewis 86], qui effectuent le calcul du champ proche transmis par une fente dans un écran épais conducteur, dans le but de comparer le calcul avec résultats expérimentaux.

Au début des années 90, divers calculs ont été réalisés, notamment dans le cas où la sonde comporte une partie guidante et une extrémité. La méthode des fonctions de Green est employée pour résoudre les équations de Maxwell à deux dimensions (2D) [Castiaux *et al.* 94]. Améliorée par un algorithme écrit par *Martin* [Martin 94], cette méthode permet l'étude de la distribution spatiale du champ à l'extérieur et à l'intérieur de la sonde, en prenant en considération les deux cas intéressants : couplage ou non avec la surface de l'échantillon. Parallèlement, *Novotny et al* [Novotny *et al.* 94] calculent le champ électromagnétique émis par des sondes métallisées 2D. La méthode numérique des multiple-multipoles (MMP) basée sur le maillage de l'objet étudié [Novotny *et al.* 95], a été aussi étendue à 3D, par les mêmes auteurs. Cette méthode a permis d'étudier la lumière qui sort de l'extrémité d'une sonde métallisée.

Une autre méthode a été implémentée avec succès pour la configuration du SNOM en mode collection, c'est la méthode des différences finies (Finite Difference Time Domain ou FDTD), qui a été utilisée pour définir la qualité du confinement électromagnétique au voisinage de l'extrémité de la sonde. L'étude du champ diffracté entrant dans l'optique de collection (objectifs de grande ouverture ou fibre optique) ainsi que la perturbation du champ par la présence de l'objet étudié [Parent *et al.* 01] ont été effectuées. Avec cette même technique, d'autres auteurs ont cherché à étudier le comportement linéaire du SNOM, en définissant une fonction de transfert liant le profil de la surface à l'image [Christenssen 95]. La modélisation de la pointe par un trou circulaire dans un écran plan



parfaitement conducteur toujours avec la même méthode, a permis de valider des calculs analytiques entrepris précédemment et de simuler des images 2D d'objets déposés sur un substrat [Kann *et al.* 95a, Kann *et al.* 95b].

*Van Labeke et al* se sont orientés vers le calcul perturbatif pour des systèmes multicouches [VanLabeke *et al.* 95], ce qui permet de prendre en considération l'interaction entre la pointe et l'échantillon. L'avantage de ces modèles est qu'ils ont permis de comprendre les mécanismes physiques de la formation des images par la détermination des expressions analytiques du champ électromagnétique. Nous reviendrons dans les prochaines sections sur ces travaux qui portent sur le SNOM en collection.

Avec l'avènement des super-calculateurs et la parallélisation des codes numériques, les capacités des machines ont augmenté, ce qui a réduit les temps de calcul pour la modélisation 2D. Des travaux récents utilisant la FDTD [Naya *et al.* 97, Hatano *et al.* 97, Furukawa et Kawata 98] ont permis d'étudier l'effet de la polarisation dans la formation des images optiques, en utilisant des modèles géométriques 3D. Souvent comparés aux résultats expérimentaux, ces travaux tentent de simuler les images obtenues en fonction des différents paramètres d'éclairage et les différents modes de balayage.

### 1.4.2 Modèles théoriques pour le SNOM en mode réflexion

Dans cette configuration plusieurs approches ont été proposées pour modéliser la configuration expérimentale. Un modèle microscopique est proposé par *Labani et al* puis par Girard et al [Labani *et al.* 90, Girard et Bouju 92]. En se basant sur la méthode des dipôles couplés, le champ incident et le champ diffusé par le dipôle extrême de la pointe sont établis en supposant un mode guidé en provenance de la partie supérieure de la fibre. Ce modèle théorique permet de déterminer le moment dipolaire induit par la surface dans la pointe, ainsi que le champ rayonné par ce dipôle dans la partie supérieure de la sonde. Une autre approche fondée sur une équation intégrale pour le champ électrique dans l'espace de Fourier [Berntsen *et al.* 93, Bozhevolnyi *et al.* 94], permet de calculer des images et d'étudier l'influence de la taille et de la forme des pointes sur la résolution. Cette technique a été reprise pour construire un modèle théorique de la conjugaison de phase du champ proche optique mise en évidence expérimentalement par le même groupe [Bozhevolnyi et Bozhevolnaya 99].

### 1.4.3 Modèles théoriques pour les calculs de diffusion par une pointe placée dans le champ proche

Dans ce genre de configuration, les modèles assimilant la pointe à une sphère ou un ensemble de dipôles ont été appliqués sans considérer le couplage avec un mode guidé dans la fibre optique. Pour étudier la résolution obtenue dans un microscope de champ proche ayant une pointe métallique, Gleyzes et al eurent l'idée d'utiliser la théorie scalaire de la diffraction de Rayleigh-Sommerfeld [Gleyzes *et al.* 95]. Pour le microscope sans

ouverture utilisant une pointe métallique, Wickramasinghe a pu expliquer le fonctionnement de cette microscopie en terme de polarisation et d'interférences entre les ondes mises en jeu [Zenhausern *et al.* 94]. Nieto-Vesperinas et Garcia ont expliqué la résolution de ce microscope à partir de l'expression perturbative du champ diffusé par l'échantillon [Madrazo et NietoVesperinas 95]. Il a été montré qu'elle dépend fortement de l'indice de réfraction de l'échantillon. Christopher et al [Kelso *et al.* 01] ont modélisé l'émission de la lumière à partir de la pointe d'un SNOM en mode réflexion et transmission, à partir d'une formulation des fonctions de Green appliquées à un modèle géométrique, incluant la partie guidante de la fibre optique et la pointe. Cette approche a permis d'évaluer le champ proche et le champ lointain en fonction des propriétés de l'échantillon (quand la constante diélectrique varie). Il existe donc une grande variété d'approches pour traiter de l'effet d'une sonde placée dans le champ proche de l'échantillon.

#### 1.4.4 Modèles théoriques du SNOM mode collection : cas du PSTM

Dans cette configuration les approches non-globales (qui ne prennent pas en compte le couplage sonde-échantillon) ont été appliquées avec succès. Une première approximation consiste à calculer le champ diffusé par l'échantillon sans prendre en compte la présence de la pointe. Ensuite un modèle de détection est appliqué pour calculer le signal collecté par la sonde.

*Salomon* propose de frustrer la réflexion totale au niveau du substrat par une pointe diélectrique, et obtient la valeur du signal qui est représentée par l'intégrale du module au carré du champ électrique sur la surface de la sonde [Salomon *et al.* 91, Salomon 92]. En utilisant une méthode perturbative, et un modèle de détection semblable à celui de *Salomon, Cites et al* [Cites *et al.* 92], calculent aussi le champ diffusé par un échantillon. Ces modèles simples ont permis de comprendre certains résultats expérimentaux, mais le modèle de détection devait être amélioré. Pour améliorer ce modèle numérique, *Sheridan et al* [Sheridan et Sheppard 93], utilisent un modèle plus raffiné (un réseau sinusoïdal) pour prendre en considération la perturbation due à la présence de la sonde, et étudier l'effet de la distance sonde-objet sur les images. Parmi les modèles développés pour étudier l'effet de la sonde dans la configuration PSTM, un modèle utilise la méthode différentielle, et considère une sonde non-périodique au voisinage d'un ensemble périodique et infini d'échantillons. La sonde est modélisée par une demi-sphère et un cône de taille sub-longueur d'onde de 150 nm et le couplage entre l'intensité collecté par la sonde et le mode propre est ignoré. Pour améliorer ce modèle et prendre en considération la présence de la sonde, un nombre infini de systèmes sonde-échantillon périodiquement distribués est utilisé pour calculer l'intensité collectée par la sonde. Mais ce modèle est resté délicat à mettre en oeuvre car la périodicité de la méthode différentielle limite la taille du système étudié. Ce sera cependant, le principe de la méthode retenue dans ce travail. Dans le chapitre suivant nous présentons les améliorations apportées à cette méthode pour prendre en compte une

sonde 2D réaliste.

Quelques années plus tard, *Weeber et al* [*Weeber et al.* 96] utilisent la transformée de Fourier du champ électromagnétique pour calculer le champ diffracté par un défaut de surface. Dans ce modèle, la sonde est décrite par un cône de hauteur sub-longueur d'onde (200 nm), et la distance sonde-échantillon est de l'ordre de 30 nm. En calculant l'intensité électrique normalisée le long d'une ligne entre la sonde et le défaut de surface, les auteurs ont montré que pour les deux polarisations TE et TM, le champ au voisinage du défaut de surface, n'est pas perturbé par la présence de la pointe de la sonde si la distance latérale entre la pointe et l'échantillon est de l'ordre de  $3\mu m$ . La perturbation due à la présence de la sonde dépend fortement de la polarisation de l'onde incidente. Ils ont montré également, que dans la polarisation TM, l'intensité électrique croît de 10% par rapport au cas de référence (objet sans sonde), alors que dans le cas de la polarisation TE, l'intensité électrique décroît de 20%. Ces résultats démontrent que la présence d'une sonde diélectrique au voisinage de la surface perturbe effectivement le champ électromagnétique.

D'autres modèles ont été proposés dans le but d'améliorer le modèle de détection, tout en utilisant la méthode perturbative. En effet, dans le modèle de *Van Labeke et Barchiesi* [*VanLabeke et Barchiesi* 92] la sonde est modélisée par une sphère diélectrique, éclairée par le champ diffusé par l'échantillon. Le signal détecté est l'intensité diffusée par la sphère dans un cône qui représente la partie guidante de la sonde. L'effet de la polarisation et le filtrage spatial ont été analysés avec ce modèle. Une autre alternative, pour améliorer le modèle de détection dans le modèle précédent consiste à utiliser la diffusion de Mie [*Mie* 08] pour étudier la diffusion des ondes évanescentes par la sphère soumise au champ diffusé par l'objet [*VanLabeke et Barchiesi* 93]. Ce modèle a permis de faire la comparaison entre le signal détecté par une sphère diélectrique et une ouverture circulaire dans une sonde métallique déjà abordé par *Roberts* [*Roberts* 91]. En effet, en utilisant la même approche non-globale [*VanLabeke et Barchiesi* 92] deux types de sondes ont été modélisées : la première est une sonde diélectrique qui est généralement utilisée dans les expériences SNOM et qui est fabriquée par attaque chimique. Généralement, dans ce type de sonde la partie active dans la détection du signal est son extrémité, l'apex, qui est modélisé par une petite sphère diffusant le champ proche au voisinage de l'objet dans la fibre. La partie conique de la fibre est collectrice du signal avec un angle solide donné. Le deuxième type considère une petite sonde, constituée d'une micro-pipette ou une fibre optique et qui peut être décrite comme une pointe conique métallisée avec une extrémité plate contrairement à la première sonde qui est sphérique. La détection est réalisée par l'apex de la sonde assimilé à un système diffuseur. En comparant la détection avec ces deux sondes, *Van Labeke et al* ont pu montrer que la première sonde réagit en fonction du module du champ électrique alors que la deuxième sonde est sensible aux deux champs électrique et magnétique. Mais ce modèle était limité en utilisation par rapport aux configurations réelles: les paramètres expérimentaux sont difficiles à intégrer dans ce modèle, notamment la taille de l'extrémité de la sonde, c'est-à-dire, le rayon de la sphère qui varie en général de 20 à 500 nm, alors que dans ce modèle il était fixe et valait  $50nm$ .

Les approches globales ont aussi connu un grand développement, notamment dans l'étude du couplage sonde-échantillon à partir de formalismes microscopiques. La méthode des dipôles couplés (CDM) a été employée par *Girard et al* pour proposer une approche microscopique dans laquelle la pointe et la surface sont considérées comme un ensemble discret de dipôles (ou multipôles) [Girard et Courjon 90, Girard et Dereux 96]. Cette méthode tient compte de l'interaction entre les dipôles pour calculer le champ électrique en tout point de l'espace considéré ainsi que le moment dipolaire induit dans la sonde, et conduit finalement à une équation intégrale auto cohérente résolue numériquement pour obtenir le flux de  $|E|^2$  à travers une section de la sonde. Ce flux est supposé représenter le signal expérimental. Bien que cette méthode ait permis d'étudier des effets très importants dans la configuration PSTM et SNOM, notamment le couplage électromagnétique entre la pointe et la surface ainsi que l'effet de polarisation, le problème du couplage entre le champ proche et le mode se propageant dans la fibre jusqu'au détecteur n'a pas été abordé [Girard et Bouju 92]. Toutefois, une amélioration de cette méthode, proposée par *Martin et al* [Martin et al. 94] a permis de développer un algorithme conduisant à une équation de type Lippman-Schwinger (qui se base sur une approche microscopique) et d'étudier ensuite des structures complexes 2D et 3D. D'autres approches ont été également utilisées pour traiter d'une façon globale les configurations PSTM et le SNOM en mode collection, en particulier la méthode perturbative multicouches [Barchiesi et VanLabeke 95].

Simultanément, d'autres approches globales ont été développées en PSTM, à partir de modèles macroscopiques auto-cohérent avec une sonde non-métallisée. Un modèle [Bozhevolnyi et Vohnsen 96] se base sur la représentation intégrale en ondes planes du champ électrique 2D. Ce modèle a permis de traiter le champ incident avec un spectre angulaire arbitraire en présence d'un milieu semi-infini avec une structure de taille sub-longueur d'onde déposé sur une surface. La formation de l'image avec le PSTM et la dispersion de la lumière près d'un miroir à conjugaison de phase sont considérés dans ce modèle. Cette simulation a permis de confirmer certains résultats, comme la différence entre l'image optique collectée par une sonde et la distribution de l'intensité au champ proche d'un objet quand la sonde n'est pas prise en compte. Cette différence a été attribuée à la perturbation du champ par la pointe de la sonde et à l'influence des composantes radiatives du champ diffracté qui interagit avec la sonde entière. Donc le signal collecté par une sonde de taille de l'ordre du micron a en général deux origines : la contribution des ondes évanescentes et celle des composantes radiatives toutes deux collectées au voisinage de l'objet.

Une autre approche globale a été adoptée par *Carminati et al* [Carminati 96] en s'appuyant sur une théorie perturbative pour comprendre les mécanismes intervenants dans la formation des images en optique de champ proche. Différents aspects liés à la configuration PSTM ont été étudiés, comme l'influence de la topographie et la variation de l'indice de l'échantillon sur le contraste des images [Carminati et Greffet 95b]. La sonde est considérée comme passive dans le but de clarifier le lien entre l'image et la structure

de l'échantillon. Généralement, ce lien est très difficile à comprendre expérimentalement et théoriquement, car il nécessite la prise en compte de nombreux paramètres, comme la polarisation du champ incident, la distance de détection et la cohérence du champ [Carminati *et al.* 97]. Cette étude a été appliquée aux différentes techniques de collecte des images, puis étendue à la modélisation des systèmes AFM avec des pointes diffusantes.

Récemment, des méthodes intégrales avec des approches globales ont connu une application très large, notamment dans la modélisation de PSTM. Ces méthodes intégrales donnent l'expression du champ diffusé en fonction du champ incident et de sa dérivée normale sur la surface (2D) ou en volume (3D) [Harrington 93]. Elles font appel au formalisme du tenseur de Green, qui permet d'accéder au champ rayonné en un point à partir d'un autre point de l'espace. Comme toutes les autres méthodes globales, les méthodes intégrales ont connu un développement et une amélioration dans le but de les adapter à des problématiques et à des configurations réelles. Tanaka et al [Tanaka *et al.* 98b, Tanaka et Tanaka 98] ont appliqué une nouvelle formulation d'une méthode intégrale dite Boundary Integral Method (BIM) [Tanaka *et al.* 98a]. Cette méthode couplée à la BEM (Boundary Element Method) se base sur des nouvelles équations intégrales, dites équations intégrales d'extraction de modes guidés. Appliquée au PSTM 2D, cette approche globale prend en considération l'interaction entre la sonde et l'échantillon sans aucune approximation. Elle a permis aussi de résoudre les équations de Maxwell en considérant un modèle géométrique plus réaliste (tenant compte de différentes formes de pointes) qu'auparavant. Différents paramètres liés à la sonde, notamment sa géométrie ainsi que la distance sonde-objet, ont pu être étudiés ainsi que leur influence sur le signal transmis par la sonde et donc sur la formation des images optique en PSTM. Ces résultats ont permis de donner un caractère prédictif à cette approche.

## 1.5 Conclusion

Nous avons présenté les notions fondamentales sur lesquelles repose le travail présenté dans cette thèse. Après un rappel des concepts de champ lointain, onde évanescente, et champ proche optique, nous avons présenté les différentes techniques de microscopie de champ proche utilisées de nos jours.

La majeure partie de ce chapitre s'est focalisée sur l'introduction de la problématique: l'étude du rôle de la sonde dans la formation des images optiques dans un PSTM. Nous avons utilisé comme première approche, le modèle analytique de Born, pour décrire le rôle des différentes grandeurs qui interviennent dans les calculs des images. Ce modèle nous a aussi permis d'introduire la notion de fonction de transfert en microscopie de champ proche. A travers la bibliographie citée au long de ce chapitre, nous avons tenté de montrer la limite de la méthode perturbative, en particulier à partir du problème du couplage sonde-surface. L'utilisation de méthodes rigoureuses et de modèles globaux est la solution aujourd'hui la plus efficace et nous nous plaçons dans cette approche pour

améliorer l'outil théorique dont dispose notre groupe.



## Chapitre 2

# Outil théorique

La méthode que nous allons utiliser dans ce travail est la méthode différentielle. Cette méthode, s'appuyant sur une décomposition modale, permet de résoudre de façon rigoureuse de nombreux problèmes d'électromagnétisme [Li 01]. Historiquement, cette méthode développée par M. Nevière [Nevière *et al.* 74b] permettait de calculer les efficacités transmises ou réfléchies par des réseaux de diffraction en vue de leur application en spectroscopie. Par la suite, cette méthode a été utilisée pour étudier des réseaux plus complexes comportant par exemple, un revêtement multicouches diélectriques et/ou métalliques, des matériaux anisotropes, des réseaux croisés. Récemment d'autres phénomènes optiques, optique non linéaire, cristaux photoniques ont été étudiés par cette méthode qui a été améliorée par l'emploi de nouveaux algorithmes (tels que l'algorithme R-matrix et S-matrix), ainsi que par les remarques de Li [Li 96] qui ont permis de repousser les limites d'utilisation de cette méthode. Le choix de cette méthode rigoureuse s'impose dans le cas d'une méthode globale voulant traiter sans approximation l'effet de la sonde sur la détection du champ électromagnétique diffracté par un objet.

Ce chapitre est composé de trois parties, la première sera consacrée aux étapes principales de la méthode différentielle, où nous rappellerons son principe de base [Petit 80]. La deuxième partie sera consacrée à la présentation de l'algorithme S-matrix qui permet de traiter des réseaux de hauteur élevée [Montiel 98]. Cette amélioration est cruciale car elle nous permettra d'introduire une sonde de hauteur réaliste pour capter le champ électromagnétique diffracté par l'objet. Nous concluons cette partie en effectuant des remarques sur la géométrie de notre système. Nous consacrerons la troisième partie de ce chapitre, d'une part à établir l'expression de l'intensité recueillie à travers les modes propres existant dans la partie guidante de la sonde, et d'autre part à examiner sur deux exemples relatifs à notre problématique, l'effet des différents paramètres numériques intervenant dans les calculs numériques.



## 2.1 Méthode Différentielle

Nous allons décrire tout d'abord la méthode différentielle dans le cas d'un réseau périodique, puis nous indiquerons les modifications inhérentes à notre système (sonde-objet). La méthode décrite dans ce chapitre ainsi que les calculs présentés ici et dans les autres chapitres sont effectués selon une géométrie bidimensionnelle (2D). Le système va être décrit par une cellule comprenant : le substrat, le système (sonde-objet), ainsi que le milieu de sortie (ou superstrat) où se situe le détecteur. Cette cellule est incluse dans le plan (x,y), et est invariante par translation dans la direction de l'axe z (voir Fig.2.1, page 38 et Fig.2.2, page 47). D'autre part, nous nous limiterons au cas de la diffraction normale, cas où le champ électrique incident est inclus dans le plan d'incidence (x,y), et au cas où le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence (ou polarisation s).

L'idée de base est simple. De part et d'autre de la zone où se situe le réseau, on montre qu'il est possible d'écrire les différentes composantes du champ électromagnétique par l'intermédiaire d'un développement, appelé développement de Rayleigh. Ce développement fait apparaître une somme infinie d'ondes planes homogènes et inhomogènes. Pour chaque onde une partie est connue, c'est le vecteur d'onde déterminé par une équation scalaire bien connue des opticiens, la formule des réseaux, et une autre partie inconnue : l'amplitude de l'onde qui sera déterminée par la méthode différentielle. Il est à noter que le développement de Rayleigh est lié au caractère périodique du système selon une des directions (ici x). De plus, puisque le système est invariant selon la direction z, les différentes composantes seront indépendantes de cette variable.

### 2.1.1 Equations de Maxwell appliquées aux réseaux 1D.

Dans un premier temps, nous définissons le système de coordonnées et les notations importantes qui seront utilisées tout au long de ce chapitre. Nous utilisons le système de coordonnées cartésiennes pour des structures périodiques où un point  $M$  est défini par son vecteur position  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , les directions des trois axes sont repérées par leurs vecteurs unités  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  et  $\mathbf{z}$ . En considérant uniquement une dépendance temporelle harmonique des champs en  $\exp(-i\omega t)$ , n'importe quel vecteur peut s'écrire ainsi:  $\mathbf{a}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{A}(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)]$ . On note respectivement les champs électrique et magnétique par  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$ . Les équations de Maxwell dans un milieu de permittivités magnétique  $\mu$  et diélectrique  $\varepsilon$  s'écrivent sous la forme suivante :

$$\text{rot}\mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H} \quad (2.1)$$

$$\text{rot}\mathbf{H} = -i\omega\varepsilon\mathbf{E} \quad (2.2)$$

Quand les équations de Maxwell sont projetées selon les axes de coordonnées cartésiennes

( $x, y, z$ ), on obtient un système de six équations différentielles partielles couplées :

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu H_x \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu H_y \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu H_z \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\varepsilon E_x \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\varepsilon E_y \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_z \quad (2.8)$$

Mais nous allons voir que dans le cas qui nous intéresse, le système d'équations précédent peut être simplifié. Le cas le plus commun est le réseau à une dimension 1D (Fig.2.1), dont les traits sont parallèles à l'axe  $Oz$ , et la forme générale du réseau est donnée par l'équation  $y = g(x)$  de période  $d$  et d'épaisseur  $a$ . La surface du réseau sépare l'espace en 3 parties, 2 parties homogènes semi-infinies, l'une dans la partie supérieure de la Fig.2.1 d'indice de réfraction  $n_2$  (pour  $y \in [a, +\infty[$ ), et l'autre dans la partie inférieure d'indice de réfraction  $n_1$  (pour  $y \leq 0$ ). La partie centrale ( $y \in [0, a]$ ) est inhomogène, car  $\forall y_0 \in [0, a]$ , l'indice de réfraction selon  $x$  prend des valeurs différentes. D'autre part, la permittivité magnétique est égale à  $\mu$  dans tout l'espace considéré. Nous supposons à partir de maintenant que les différents milieux sont linéaires, isotropes, et non magnétiques ( $\mu = \mu_0$ ).

Puisque dans notre travail, on se restreint au cas de la diffraction normale; c'est-à-dire au cas où la direction de la lumière incidente appartient à un plan perpendiculaire aux traits du réseau, alors le vecteur d'onde incident s'écrit :

$$\mathbf{k}_2 = n_2 \frac{2\pi}{\lambda_0} (\sin \theta_2, -\cos \theta_2, 0),$$

où  $\lambda_0$  est la longueur d'onde du faisceau incident. Le vecteur champ électrique incident est alors donné par :

$$\mathbf{E}^{(i)} = \mathbf{A} \exp i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} = \mathbf{A} \exp [ik_2(x \sin \theta_2 - y \cos \theta_2)] \quad (2.9)$$

où  $k_2 = |\mathbf{k}_2|$  et  $\mathbf{A}$  représente le vecteur polarisation.

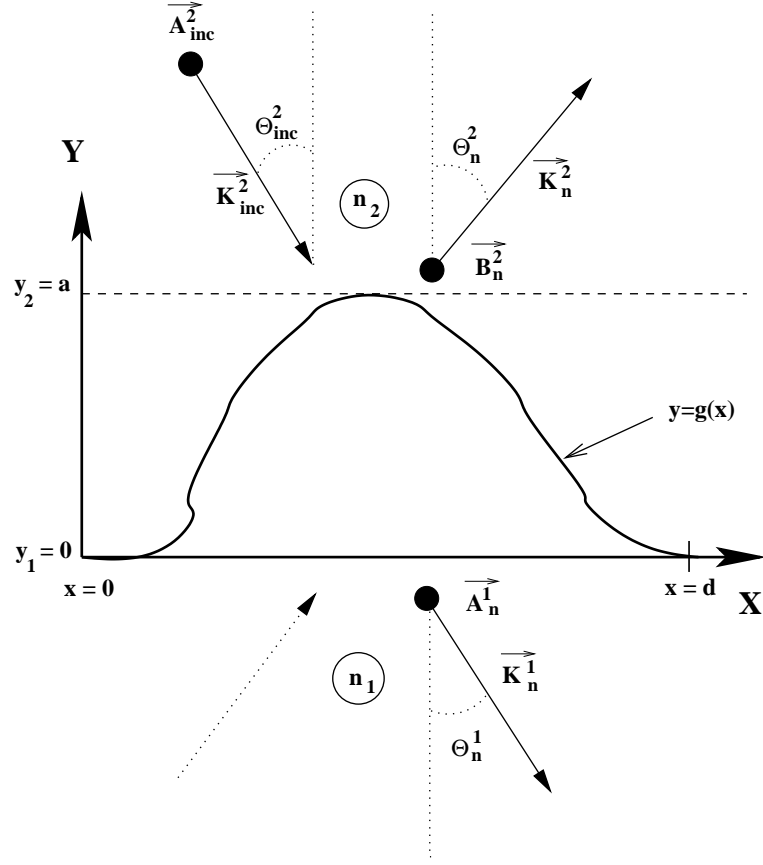


FIG. 2.1: Schéma d'un réseau à 1 Dimension. Ce schéma définit les principales notations et les caractéristiques physiques introduites dans le texte.

Du fait que l'onde plane incidente et la géométrie du système sont invariantes suivant la direction  $oz$ , l'ensemble des équations (2.3 à 2.8) se réduit à un système d'équations plus simples :

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = i\omega\mu H_x \quad (2.10)$$

$$-\frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu H_y \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu H_z \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_x \quad (2.13)$$

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\varepsilon E_y \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_z \quad (2.15)$$

A partir de ce système d'équations, nous voyons que toute onde polarisée dans une direction quelconque peut être étudiée en résolvant les deux cas de polarisations indépendantes, dites polarisations fondamentales s et p. L'ensemble des 6 équations précédentes se scindent en deux sous-systèmes indépendants faisant intervenir dans le cas de la polarisation s (ou TE) les équations 2.10, 2.11 et 2.15 et dans le cas de la polarisation p (ou TM) 2.12, 2.13 et 2.14. Dans le cas de la polarisation s (resp. p), le vecteur polarisation de l'onde incidente  $\mathbf{A}$  du champ électrique (resp. champ magnétique) ainsi que les vecteurs polarisation des différents ordres diffractés sont parallèles au réseau, c'est à dire à l'axe  $oz$ . De plus, l'une des équations de chacun des sous-systèmes précédents peut être éliminée en exprimant la composante du champ  $y$  selon les 2 autres composantes. En polarisation s, nous obtenons alors un système de deux équations à deux inconnues ( $E_z, \tilde{H}_x$ ) tel que :

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = \tilde{H}_x \quad (2.16)$$

et

$$\frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial y} = -k^2(x, y)E_z - \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.17)$$

avec  $k^2(x, y) = \omega^2\mu\varepsilon(x, y)$  et  $\tilde{H}_x = i\omega\mu H_x$ .

De plus, en substituant l'équation 2.16 dans l'équation 2.17, nous obtenons l'équation de propagation suivante :

$$\Delta E_z(x, y) + k^2(x, y)E_z(x, y) = 0 \quad (2.18)$$

Bien que cette dernière équation puisse être résolue par l'emploi d'un algorithme dit de Noumerov [Abramowitz et Stegun 65], il est néanmoins nécessaire de connaître 2 composantes du champ électromagnétique,  $E_z$  et sa dérivée première selon  $y$  qui est en fait proportionnelle à  $H_x$ . Le cas de la polarisation s n'est donc pas scalaire. Par homogénéité par rapport à l'autre cas de polarisation ou dans le cas plus complexe de la diffraction conique (où l'algorithme de Noumerov n'est pas utilisable), on applique la méthode différentielle au système d'équations différentielles du 1<sup>er</sup> ordre représenté par les équations 2.16 et 2.17.

En polarisation p, une procédure analogue nous donne les équations suivantes :

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = k^2(x, y)\tilde{E}_x \quad (2.19)$$

et

$$\frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial y} = -H_z - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{k^2} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (2.20)$$

où  $\tilde{E}_x = E_x / i\omega\mu$ .

A partir de ces équations, nous obtenons aussi l'équation de propagation du second ordre (2.21) et de manière similaire au cas de la polarisation s, la résolution du problème s'effectue par le traitement du système d'équations 2.19 et 2.20.

$$\operatorname{div} \left[ \frac{1}{k^2(x, y)} \mathbf{grad} H_z(x, y) \right] + H_z(x, y) = 0 \quad (2.21)$$

### 2.1.2 Propriétés des composantes du champ électromagnétique.

Afin de résoudre les systèmes d'équations (2.16, 2.17) et (2.19, 2.20), nous allons maintenant énumérer les différentes propriétés des composantes du champ électromagnétique et les étapes importantes qui font de la méthode différentielle un outil performant pour différents problèmes en électromagnétisme.

1. Nous supposons que la solution au problème de diffraction existe et elle est unique [Cadilhac 80].
2. Puisque nous nous situons dans le cas de l'optique linéaire, on peut associer au réseau un opérateur linéaire qui transforme le champ incident  $u^{(i)}(x, y)$  en un champ total  $u(x, y)$ , où  $u$  dénote n'importe quelle composante de  $\mathbf{E}$  ou de  $\mathbf{H}$ .
3. Du fait qu'il y a périodicité de l'indice de réfraction (ou de la constante diélectrique) liée au réseau, le champ incident  $u^i$  et le champ total  $u$  sont pseudo-périodiques en  $x$  avec la période du réseau  $d$  [Nevière *et al.* 71]. Cette pseudo-périodicité s'écrit :

$$u(x + d, y) = \exp(i\alpha_0 d) u(x, y) \quad \text{avec} \quad \alpha_0 = k_2 \sin \theta_2 \quad (2.22)$$

4. Par conséquent, si  $u(x, y)$  est pseudo-périodique, la fonction :

$$v(x, y) = \exp(-i\alpha_0 x) u(x, y) \quad (2.23)$$

est périodique en  $x$  et de période  $d$  et elle peut être représentée par une série de Fourier  $u_n(y)$  étant ses composantes de Fourier:

$$v(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(y) \exp(inKx) \quad (2.24)$$

où

$$K = \frac{2\pi}{d} \quad (2.25)$$

est le vecteur d'onde du réseau réciproque. D'où le développement en pseudo-série de Fourier des composantes  $u(x, y)$  :

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(y) \exp(i\alpha_n x) \quad (2.26)$$

avec  $\alpha_n = \alpha_0 + n \frac{2\pi}{d}$ .

Comme nous l'avons déjà dit précédemment, le but de la méthode est de déterminer les fonctions  $u_n(y)$ , qui sont liées aux ordres de diffraction, propagatifs et évanescents dans le milieu d'indice  $n_1$  et le milieu d'indice  $n_2$ . Mais à l'extérieur de la zone modulée,  $u_n(y)$ , peut être présenté sous une forme plus simple, en utilisant le développement de Rayleigh [Rayleigh 07],[Petit 66].

5. Dans les 2 zones homogènes, les deux équations de propagation peuvent être écrites sous la forme suivante :

$$\Delta u(x, y) + k_i^2 u(x, y) = 0 \quad (2.27)$$

avec  $i \in (1, 2)$  et où  $u(x, y)$  est la seule composante non-nulle du champ selon  $z$  et dépendant de la polarisation. C'est-à-dire  $u(x, y) = E_z$  en polarisation s et  $u(x, y) = H_z$  en polarisation p. Dans les zones homogènes, le développement de Rayleigh suggère que le champ total puisse être écrit comme une somme d'ondes planes propagatives et évanescentes.

Dans le milieu d'où provient l'onde incidente (dans notre cas, le milieu d'indice de réfraction  $n_2$  de la zone supérieure de la Fig 2.2, page 47), la solution a la forme suivante :

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \{A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)} y) + B_n^{(2)} \exp(i\beta_n^{(2)} y)\} \exp(i\alpha_n x) \quad (2.28)$$

où les deux parties de  $u(x, y)$  représentent deux ensembles de solutions et sont notées :

$$u^- = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(2)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_n^{(2)} y) \quad (2.29)$$

$$u^+ = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(2)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_n^{(2)} y) \quad (2.30)$$

avec :

$$\beta_n^{(2)} = \sqrt{k_2^2 - \alpha_n^2} \quad \text{pour} \quad k_2^2 - \alpha_n^2 \geq 0$$

et

$$\beta_n^{(2)} = i\sqrt{\alpha_n^2 - k_2^2} \quad \text{pour} \quad k_2^2 - \alpha_n^2 < 0$$

La première partie  $u^-$  consiste en un nombre fini d'ondes planes entrantes (incidentes) propagatives (avec  $k_2^2 - \alpha_n^2 \geq 0$ ) et un nombre infini d'onde anti-évanescents ( $k_2^2 - \alpha_n^2 < 0$ ). La deuxième partie  $u^+$  est la somme d'un nombre fini d'ondes planes sortantes et un nombre infini d'ondes évanescents. En effet, ces ordres diffractés sont soit propagatifs ou évanescents dans le milieu d'indice  $n_2$ . Ce qui fait dès lors que l'on connaît l'angle d'incidence, la longueur d'onde et l'indice de réfraction de cette zone homogène, on est capable de montrer les différentes ondes propagatives et évanescents dans la base  $\exp(i\alpha_n x)$ . Cependant le problème de diffraction n'aura qu'une seule solution, il sera complètement déterminé quand le champ incident sera spécifié. En éliminant les solutions qui divergent quand  $y \rightarrow +\infty$  (solutions non physiques) et en gardant une seule onde incidente (par exemple) pour  $n = 0$ , l'Eq. (2.28) prend la forme connue, dite du développement de Rayleigh :

$$u(x, y) = A_0^{(2)} \exp(i\alpha_0 x - i\beta_0^{(2)} y) + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(2)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_n^{(2)} y) \quad (2.31)$$

où  $B_n^{(2)}$  est le coefficient de Rayleigh réfléchi ou l'amplitude de l'ordre diffracté réfléchi.

Dans le milieu d'indice  $n_1$ , d'où ne provient pas l'onde incidente, la solution prend la forme:

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \{A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)} y) + B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)} y)\} \exp(i\alpha_n x) \quad (2.32)$$

où le second terme contient des ondes propagatives entrantes quand  $\beta_n^{(1)}$  est réel positif. Quand  $\beta_n^{(1)}$  est imaginaire pur, ces ondes correspondent à des ondes anti-évanescents qui divergent quand  $y \rightarrow -\infty$  et doivent être exclues de la solution. En l'absence d'incidence à partir du milieu d'indice  $n_1$ , c'est la Condition d'Onde Sortante (ou C.O.S.), l'Eq. (2.32) est réduite au développement de Rayleigh du champ transmis comme suit :

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)} y) \exp(i\alpha_n x) \quad (2.33)$$

où  $A_n^{(1)}$  est le coefficient de Rayleigh transmis ou l'amplitude de l'ordre diffracté transmis.

### 2.1.3 Expression du champ dans la zone modulée.

Dans cette zone la décomposition de Rayleigh n'est plus valable. En effet, l'indice de réfraction dans ce cas n'étant plus constant la résolution de (2.18) n'est plus aussi facile que dans les zones homogènes.

Dans la zone modulée ( $0 < y < a$ ) uniquement, le développement en pseudo-série de Fourier est valable, ce qui implique que les fonctions inconnues  $u_n(y)$  ne peuvent pas être exprimées en fonction des fonctions exponentielles. La seule possibilité est de déterminer ces fonctions par un calcul numérique.

Si on exprime maintenant, la fonction  $k^2(x, y)$ , qui est périodique en  $x$ , en fonction de séries de Fourier, on obtient le développement suivant :

$$k^2(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (k^2)_n(y) \exp(inKx) \quad (2.34)$$

Or le produit  $k^2(x, y)E_z(x, y)$  est pseudo-périodique en fonction de  $x$ , et donc on peut l'exprimer dans la base  $\exp(i\alpha_n x)$ .

En introduisant les expressions (2.26) et (2.34) dans l'équation de propagation (2.18) nous obtenons:

$$\forall n : \frac{d^2 E_n(y)}{dy^2} + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (k^2)_{n-m}(y) E_m(y) - \alpha_n^2 E_n(y) = 0 \quad (2.35)$$

Où  $E_n(y)$  sont les composantes de Fourier de  $E_z$ .

A l'intérieur de la zone modulée et dans le but d'obtenir une solution numérique de ces équations différentielles couplées, la sommation sur le nombre de modes, doit être tronquée. Pour ceci, nous supposons que le champ est entièrement décrit par  $2N + 1$  composantes de Fourier  $E_n(y)$ , avec  $n \in [-N, +N]$ . La valeur de  $N$  sera déterminée par un test de convergence en champ lointain. Si on considère uniquement un vecteur colonne  $[\mathbf{E}(y)]$  avec  $2N + 1$  composantes  $E_n(y)$ , et une matrice  $M^{TE}$  carrée de dimension  $(2N + 1) \times (2N + 1)$  avec les éléments :  $M_{nm}^{TE}(y) = -(k^2)_{n-m} + \alpha_n^2 \delta_{nm}$ . L'Eq. (2.35), sera simplifiée comme suit :

$$\frac{d^2 [\mathbf{E}(y)]}{dy^2} = M^{TE}(y) [\mathbf{E}(y)] \quad (2.36)$$

En dehors de la zone modulée, la solution  $[\mathbf{E}(y)]$  doit être identique à l'expression déduite du développement de Rayleigh. Puisque la composante tangentielle de  $\mathbf{E}$  doit être continue,  $E_z$  doit être continue en  $y = a$  et  $y = 0$ . Ceci implique les relations suivantes:

$$E_n(a) = A_0^{(2)} \exp(-i\beta_0^{(2)} a) \delta_{n,0} + B_n^{(2)} \exp(+i\beta_n^{(2)} a) \quad (2.37)$$

$$E_n(0) = A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)} 0) = A_n^{(1)} \quad (2.38)$$



De la même façon on peut déduire la dérivée première de  $E_n(y)$  qui peut être déduite aussi de la continuité de la composante tangentielle de  $\mathbf{H}$ . Nous obtenons donc :

$$\frac{dE_n(a)}{dy} = -i\beta_0^{(2)} A_0^{(2)} \exp(-i\beta_0^{(2)} a) \delta_{n,0} + i\beta_n^{(2)} B_n^{(2)} \exp(+i\beta_n^{(2)} a) \quad (2.39)$$

$$\frac{dE_n(0)}{dy} = -i\beta_n^{(1)} A_n^{(1)} \quad (2.40)$$

A partir des équations (2.37) et (2.39), nous obtenons finalement les coefficients de Rayleigh dans la zone modulée:

$$B_n^{(2)} = \frac{1}{2} \left[ E_n(a) + \frac{1}{i\beta_n^{(2)}} \frac{dE_n(a)}{dy} \right] \exp(-i\beta_n^{(2)} a) \quad (2.41)$$

$$A_n^{(2)} = \frac{1}{2} \left[ E_n(a) - \frac{1}{i\beta_n^{(2)}} \frac{dE_n(a)}{dy} \right] \exp(+i\beta_n^{(2)} a) \quad (2.42)$$

#### 2.1.4 Matrices de Réflexion et de Transmission d'un réseau

Nous introduisons maintenant les matrices de réflexion et de transmission d'un réseau, qui sont une généralisation des coefficients de Fresnel de réflexion et de transmission d'un dioptre plan. Au lieu d'avoir une seule onde plane, nous nous mettons dans le cas général où nous supposons qu'on a  $(2N+1)$  ondes incidentes de la forme :  $A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)} y) \exp(\alpha_n x)$  selon le développement de Rayleigh. Nous définissons ainsi trois vecteurs de  $(2N+1)$  composantes, qui représentent les champs incident, réfléchi et transmis de part et d'autre du réseau :

$$V_A^{(2)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)} a) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, V_B^{(2)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ B_n^{(2)} \exp(+i\beta_n^{(2)} a) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, V_A^{(1)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

Nous définissons, les matrices  $M_A$  et  $M_B$  comme suit :

$$V_A^{(2)} = M_A V_A^{(1)} \quad (2.44)$$

$$V_B^{(2)} = M_B V_A^{(1)} \quad (2.45)$$

En mathématique une application linéaire qui agit dans un espace de dimension finie, est entièrement déterminée quand l'image des vecteurs de base est connue. Par conséquent, si pour  $V_A^{(1)}$  on choisit  $(2N + 1)$  vecteurs indépendants  $V_{A,p}^{(1)}$  ( $p \in [-N, +N]$ ), avec les éléments suivants:

$$V_{A,n,p}^{(1)} = \delta_{n,p} \quad (2.46)$$

alors les équations (2.44 et 2.45) montrent que les matrices  $M_A$ , et  $M_B$  seront construites avec deux ensembles de  $(2N + 1)$  vecteurs  $V_{A,p}^{(2)}$ , et  $V_{B,p}^{(2)}$ . De cette manière, les matrices  $M_A$  et  $M_B$  seront définies à la fin du processus d'intégration. Le processus d'intégration utilisé est l'algorithme de Runge-Kutta d'ordre 4, mais d'autres algorithmes sont utilisables. Pour cela, il suffit d'extraire les valeurs de  $V_{A,n,p}^{(2)}$  et  $V_{B,n,p}^{(2)}$  à partir des définitions de  $E_{n,p}(a)$  et  $\frac{dE_{n,p}}{dy}(a)$  en polarisation  $s$  [Nevière *et al.* 74a]. A partir des équations (2.37) et (2.39), nous obtenons les expressions suivantes :

$$T_{A,n,p} = V_{A,n,p}^{(2)} = A_{n,p}^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)}a) = \frac{1}{2} \left[ E_{n,p}(a) - \frac{1}{i\beta_n^{(2)}} \frac{dE_{n,p}}{dy}(a) \right] \quad (2.47)$$

$$T_{B,n,p} = V_{B,n,p}^{(2)} = B_{n,p}^{(2)} \exp(+i\beta_n^{(2)}a) = \frac{1}{2} \left[ E_{n,p}(a) + \frac{1}{i\beta_n^{(2)}} \frac{dE_{n,p}}{dy}(a) \right] \quad (2.48)$$

Une fois les matrices  $M_A$  et  $M_B$  déterminées, il est facile d'associer le champ transmis au champ incident, ce qui définit la matrice de transmission ( $t$ ) par :

$$V_A^{(1)} = tV_A^{(2)} \quad (2.49)$$

$$t = (M_A)^{-1} \quad (2.50)$$

La matrice de réflexion ( $r$ ) est définie par :

$$V_B^{(2)} = rV_A^{(2)} \quad (2.51)$$

$$r = M_B (M_A)^{-1} \quad (2.52)$$

Il est important de mentionner qu'une fois les matrices ( $t$ ) et ( $r$ ) calculées, les champs transmis et réfléchi  $V_A^{(1)}$  et  $V_B^{(2)}$  correspondent à toute forme de champ incident donné par  $\sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)}y) \exp(i\alpha_n x)$ . Les 2 quantités,  $V_A^{(1)}$  et  $V_B^{(2)}$  sont déterminés par un simple produit de matrice et de vecteur colonne, sans effectuer une nouvelle intégration numérique.

Quand une seule onde plane arrive sur le réseau ( $A_n^{(2)} = \delta_{n,0}$ ), le champ transmis est réduit à la colonne de rang 0 de la matrice ( $t$ ):

$$V_{A,n}^{(1)} = t_{n,0} \exp(-i\beta_0^{(2)}a) \quad (2.53)$$

En suivant le même raisonnement, nous obtenons pour le champ réfléchi:

$$V_{B,n}^{(2)} = r_{n,0} \exp(-i\beta_0^{(2)} a) \quad (2.54)$$

### 2.1.5 Problème numérique

L'extension de l'application de la méthode différentielle dans le domaine de l'optique appliquée a mis l'accent sur les problèmes de divergence numérique qui apparaissent durant l'intégration numérique. La propagation des différentes ondes évanescentes (ou anti-évanescentes) au travers de la zone modulée, constituée du réseau, va engendrer des problèmes numériques quand la hauteur de celui-ci devient trop importante par rapport à la portée des ondes évanescentes (ou anti-évanescentes) qui se propagent. La portée de ces ondes évanescentes (ou anti-évanescentes) est décrite par la quantité  $\beta_n^{(1)}$  introduite précédemment. Si la hauteur du réseau est importante ( $y$  devient grand) ou si l'indice de réfraction du milieu périodique est important ( $\beta_n^{(1)}$  devient grand), ou si le nombre de modes nécessaires pour bien décrire le système devient important ( $\beta_n^{(1)}$  devient grand), alors l'erreur commise par l'ordinateur (lié au fait qu'il travaille sur un nombre fini de digits), lors de la propagation de cette condition initiale risque d'être du même ordre de grandeur que la solution calculée, d'où les problèmes numériques rencontrés [Nevière 91], [Goumri-Said *et al.* 04a, Goumri-Said 03].

Pour résoudre ces problèmes de contamination numérique, la solution consiste à diviser le réseau de hauteur élevée en différentes couches où le processus (méthode différentielle) décrit précédemment va être appliqué à chacune de ces couches. Celles-ci doivent être suffisamment minces de telle manière que la contamination n'apparaisse plus. Cependant cette condition n'est pas suffisante comme nous le verrons dans le chapitre suivant. Elle aboutit à l'algorithme de propagation T qui ne résout pas complètement le problème mais fournit une étape de base. Pour contourner le fait que le calculateur puisse être amené à manipuler des produits de nombres aboutissant soit à des nombres très grands (overflow) ou très petits (underflow), on fait appel à un algorithme récursif qui reprend l'idée de l'algorithme de propagation T tout en éliminant ce dernier problème; c'est l'algorithme de propagation S qui fera l'objet de la prochaine section.

## 2.2 L'algorithme de propagation S

Dans cette section nous allons montrer comment remédier aux différents problèmes liés à la divergence numérique en utilisant l'algorithme de propagation S. Pour cela, nous traitons uniquement le cas de la polarisation s, qui est le cas que nous avons traité dans notre travail. Avant d'aborder l'algorithme S, il est nécessaire d'introduire une étape préliminaire, l'algorithme de propagation T.

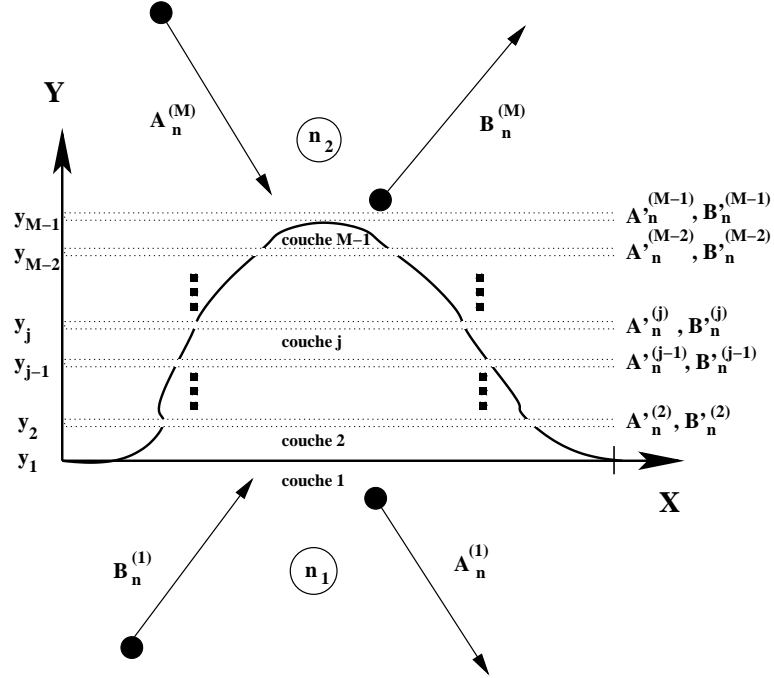


FIG. 2.2: Empilement des différentes couches dans la zone modulée. Notation des coefficients de Rayleigh dans les zones homogènes, pour définir les algorithmes matriciels.  $M$  constitue le nombre de couches utilisées pour découper la zone modulée

### 2.2.1 Algorithme de propagation T

Quand le profil d'un réseau est inclus dans un empilement d'un nombre donné de couches inhomogènes et homogènes, comme le montre la Fig2.2, toutes les couches exceptées les 2 extrêmes reçoivent en haut et en bas des ondes entrantes et sortantes. Dans ce cas, on peut généraliser le concept de matrice de transmission ( $t$ ) et de réflexion ( $r$ ) que nous avons introduit précédemment en utilisant une super matrice, définie par  $T$ , qui lie les vecteurs entrants et sortants des couches inférieure et supérieure. Ceci aboutit à l'algorithme de propagation T. Pour chaque ordonnée  $y_j, j \in [1, M - 1]$ , qui sépare deux couches de la zone modulée, on introduit des couches infiniment minces homogènes (par exemple du même indice de réfraction que le substrat), dans lequel le développement de Rayleigh est valable. En  $y_j$ , on peut alors écrire :

$$E(x, y) = \sum_{n=-N}^{n=+N} \left[ A_n^{(j)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_j) + B_n^{(j)} \exp(+i\beta_n^{(M)} y_j) \right] \exp(i\alpha_n x) \quad (2.55)$$

où  $\beta_n^{(M)}$  ont déjà été définis dans section (2.1.4). On peut aussi noter que  $A_n^{(1)} = A_n^{(1)}$  et  $B_n^{(1)} = B_n^{(1)}$  car  $y_1 = 0$ . On a aussi  $A_n^{(M-1)} = A_n^{(M)}$  et  $B_n^{(M-1)} = B_n^{(M)}$  car  $M$  est l'indice

qui définit la dernière interface de l'empilement du réseau. Nous considérons maintenant, les vecteurs  $V^{(j)}$  de  $2(2N + 1)$  dimensions composés à partir des composantes de Fourier d'ondes sortantes et entrantes de l'interface  $y_j$  :

$$V^{(j)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(j)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_j) \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ B_n^{(j)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_j) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

Cette matrice colonne contient deux blocs, comme  $V_A^{(2)}$  et  $V_B^{(2)}$  (définis en section 2.14) dans lesquels  $a$  est remplacé par  $y_j$ ,  $A_n^{(2)}$  par  $A_n^{(j)}$ , et  $B_n^{(2)}$  par  $B_n^{(j)}$ .

On peut définir maintenant une nouvelle matrice  $T^{(j)}$  de la  $j^{\text{ième}}$  couche par :

$$V^{(j)} = T^{(j)} V^{(j-1)} \quad (2.57)$$

L'intérêt de cette matrice réside dans le fait que la matrice générale  $T$  d'un empilement de  $M - 2$  couches horizontales, contenant des zones modulées et/ou homogènes peut être obtenue par le produit des  $(M - 2)$  matrices  $T^{(j)}$  de transmission de chacune des couches. En effet, nous avons la relation suivante:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ B_n^{(M)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \end{pmatrix} = T^{(M-1)} \dots T^{(j)} \dots T^{(3)} T^{(2)} \begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ B_n^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

Donc par comparaison des deux expressions (2.58) et (2.57), nous obtenons :

$$T = T^{(M-1)} \dots T^{(j)} \dots T^{(3)} T^{(2)} \quad (2.59)$$

Une fois la matrice  $T$  calculée, la condition d'onde sortante dans le superstrat ( $B_n^{(1)} = 0$  ( $\forall n$ )), nous permet de déterminer les coefficients de Rayleigh transmis dans le superstrat et réfléchi dans le substrat. Pour cela, nous divisons la matrice  $T$  en 4 blocs  $T_{ij}$ , avec  $(i, j) = (1, 2)$ , de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ B_n^{(M)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

l'Eq. (2.60) conduit à :

$$A_n^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) = \sum_{m=1}^{2N+1} T_{11(n,m)} A_m^{(1)} \quad (\forall n \in [1, 2N+1]) \quad (2.61)$$

et

$$B_n^{(M)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) = \sum_{m=1}^{2N+1} T_{21(n,m)} A_m^{(1)} \quad (\forall n \in [1, 2N+1]) \quad (2.62)$$

En inversant l'Eq. (2.61) et en la comparant avec Eq. (2.49) , nous obtenons:

$$t = (T_{11})^{-1} \quad (2.63)$$

De même pour les Eq. (2.51), (2.61) et (2.62), nous obtenons :

$$r = T_{21} (T_{11})^{-1} \quad (2.64)$$

Une fois les matrices déterminées, les coefficients de Rayleigh sont calculés à l'aide des équations (2.53) et (2.54) et ils prennent la forme suivante:

$$B_n^{(M)} = r_{n,0} \exp \left[ -i(\beta_n^{(M)} + \beta_0^{(M)}) y_{M-1} \right] \quad (2.65)$$

$$A_n^{(1)} = t_{n,0} \exp \left[ -i\beta_0^{(M)} y_{M-1} \right] \quad (2.66)$$

Il est à noter que le calcul de la matrice  $T$  est identique à celui que nous avons effectué pour calculer les matrices  $M_A$  et  $M_B$  de la section précédente. En comparant les Eq. (2.60), (2.44) et (2.45), nous avons montré que  $M_A$  est équivalent à  $T_{11}$  et  $M_B$  équivalent à  $T_{21}$ . La différence dans le cas de l'algorithme de propagation  $T$  sont les 2 matrices supplémentaires  $T_{12}$  et  $T_{22}$  qui sont liées aux ondes entrantes de la couche inférieure, ondes qui n'existent pas dans le cas d'une seule couche, puisque nous retombons sur le cas de la condition d'onde sortante ( $\beta_n^{(1)} = 0 \forall n$ ). En fait, dans le cas de l'algorithme de propagation  $T$ , nous sommes amenés à calculer l'image de  $2(2N+1)$  vecteurs de base, les  $(2N+1)$  montants et les  $(2N+1)$  descendants, et ceci pour chaque couche.

Malgré un élargissement du champ de résolution de certains problèmes, notamment dans le domaine des rayons X et des réseaux multi-couches [Marshall 85], le problème des réseaux profonds n'est pas complètement résolu avec l'algorithme de propagation T. En fait, pour un nombre de modes fixés et une épaisseur des couches ad hoc, chaque matrice  $T^{(j)}$  peut être calculée sans que l'on rencontre de problème numérique, cependant lors du calcul des différents produits  $T^{(j)}$ , des problèmes d'overflow peuvent apparaître, d'où l'utilisation de l'algorithme de propagation S.

### 2.2.2 Algorithme de propagation S.

La différence entre l'algorithme S et l'algorithme T est que l'on va relier les ondes sortantes d'une couche quelconque de la zone modulée aux ondes entrantes de cette même couche. La matrice  $S^{(q)}$  d'un empilement de  $q$  couches peut être défini comme ceci :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(q)} e^{i\beta_n^{(M)} y_q} \\ \vdots \\ A_n^{(1)} e^{-i\beta_n^{(1)} y_1} \\ \vdots \end{pmatrix} = S^{(q)} \begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(1)} e^{i\beta_n^{(1)} y_1} \\ \vdots \\ A_n^{(q)} e^{-i\beta_n^{(M)} y_q} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

**Remarque :** Nous voyons à partir de cette définition que  $S^{(q)}$  n'est pas la matrice de propagation  $S$  au travers de la couche numéro  $q$ , mais la matrice de propagation S au travers des  $q$  premières couches.

A partir de l'équation précédente, nous faisons apparaître 4 blocs pour la matrice  $S$ ,  $S_{ij}^{(q)}$  avec  $(i, j) = (1, 2)$ . Par exemple les matrices  $S_{11}^{(q)}$  et  $S_{12}^{(q)}$  sont respectivement les matrices de transmission et de réflexion, qui donnent l'amplitude des ondes montantes (sortantes) de la  $q^{\text{ième}}$  couche en fonction de la transmission de l'onde montante du milieu 1 et de la réflexion par l'empilement de l'onde incidente sortante de la  $q^{\text{ième}}$  couche ( $S_{12}^{(q)} \equiv r$ ).

L'algorithme de propagation S est construit en écrivant l'Eq. (2.67) au niveau des  $q^{\text{ième}}$  et  $q+1^{\text{ième}}$  couches. On définit aussi les vecteurs colonnes  $\tilde{A}^{(q)}$  et  $\tilde{B}^{(q)}$  par les composantes suivantes :

$$\tilde{B}_n^{(q)} = B_n^{(q)} \exp\left(i\beta_n^{(M)} y_q\right) \quad (2.68)$$

et

$$\tilde{A}_n^{(q)} = A_n^{(q)} \exp\left(-i\beta_n^{(M)} y_q\right) \quad (2.69)$$

On obtient les relations entre les matrices bloc:

$$\tilde{B}^{(q+1)} = S_{11}^{(q+1)} \tilde{B}^{(1)} + S_{12}^{(q+1)} \tilde{A}^{(q+1)} \quad (2.70)$$

$$\tilde{A}^{(1)} = S_{21}^{(q+1)} \tilde{B}^{(1)} + S_{22}^{(q+1)} \tilde{A}^{(q+1)} \quad (2.71)$$

et

$$\tilde{B}^{(q)} = S_{11}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + S_{12}^{(q)} \tilde{A}^{(q)} \quad (2.72)$$

$$\tilde{A}^{(1)} = S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + S_{22}^{(q)} \tilde{A}^{(q)} \quad (2.73)$$

On relie après les ondes sortantes et entrantes par le biais de la définition de la matrice  $T$  donnée par l'Eq.(2.57) :

$$\tilde{A}^{(q+1)} = T_{11}^{(q+1)} \tilde{A}^{(q)} + T_{12}^{(q+1)} \tilde{B}^{(q)} \quad (2.74)$$

$$\tilde{B}^{(q+1)} = T_{21}^{(q+1)} \tilde{A}^{(q)} + T_{22}^{(q+1)} \tilde{B}^{(q)} \quad (2.75)$$

En remplaçant  $\tilde{B}^{(q)}$  par l'expression donnée par l'Eq. (2.72) dans l'Eq. (2.75), nous obtenons :

$$\tilde{B}^{(q+1)} = \left( T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)} \right) \tilde{A}^{(q)} + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} \quad (2.76)$$

L'équation (2.73) peut s'écrire :

$$\tilde{A}^{(q)} = \left( S_{22}^{(q)} \right)^{-1} \left( \tilde{A}^{(1)} - S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} \right) \quad (2.77)$$

Ceci permet de reformuler l'équation (2.76) :

$$\begin{aligned} \tilde{B}^{(q+1)} &= \left( T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)} \right) \left( S_{22}^{(q)} \right)^{(-1)} \tilde{A}^{(1)} \\ &+ \left[ T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} - \left( T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)} \right) \left( S_{22}^{(q)} \right)^{(-1)} S_{21}^{(q)} \right] \tilde{B}^{(1)} \end{aligned} \quad (2.78)$$

Et en remplaçant  $\tilde{A}^{(1)}$  par son expression donnée par l'Eq. (2.71), on obtient :



$$\begin{aligned}
\tilde{B}^{(q+1)} &= [(T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{21}^{(q+1)} \\
&+ T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} - (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{21}^{(q)}] \tilde{B}^{(1)} \\
&+ (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{22}^{(q+1)} \tilde{A}^{(q+1)}
\end{aligned} \tag{2.79}$$

De manière analogue, en introduisant  $\tilde{A}^{(q)}$  donné par l'Eq. (2.77) dans l'Eq. (2.74), on obtient :

$$\tilde{A}^{(q+1)} = T_{11}^{(q+1)} (S_{22}^{(q)})^{-1} \tilde{A}^{(1)} - T_{11}^{(q+1)} (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + T_{12}^{(q+1)} \tilde{B}^{(q)} \tag{2.80}$$

En remplaçant  $\tilde{B}^{(q)}$  par sa valeur donnée par l'Eq. (2.72) on obtient :

$$\begin{aligned}
\tilde{A}^{(q+1)} &= T_{11}^{(q+1)} (S_{22}^{(q)})^{-1} \tilde{A}^{(1)} - T_{11}^{(q+1)} (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \tilde{B}^{(q)} \\
&+ T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)} (S_{22}^{(q)})^{-1} (\tilde{A}^{(1)} - S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)})
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
\tilde{A}^{(q+1)} &= (T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) (S_{22}^{(q)})^{-1} \tilde{A}^{(1)} \\
&- (T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) (S_{22}^{(q)})^{-1} S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \tilde{B}^{(1)}
\end{aligned}$$

En introduisant la matrice  $Z^{(q)}$  définie par :

$$Z^{(q)} = (T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)})^{-1}, \tag{2.81}$$

l'équation précédente s'écrit :

$$S_{22}^{(q)} Z^{(q)} \tilde{A}^{(q+1)} = \tilde{A}^{(1)} - S_{21}^{(q)} \tilde{B}^{(1)} + S_{21}^{(q)} Z^{(q)} T_{12}^{(q)} S_{11}^{(q+1)} \tilde{B}^{(1)}$$

d'où nous obtenons :

$$\tilde{A}^{(1)} = (S_{22}^{(q)} - S_{22}^{(q)} Z^{(q)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)}) \tilde{B}^{(1)} + S_{22}^{(q)} Z^{(q)} \tilde{A}^{(q+1)} \tag{2.82}$$

En identifiant termes à termes avec l'Eq.(2.71), nous obtenons :

$$S_{22}^{(q+1)} = S_{22}^{(q)} Z^{(q)} \quad (2.83)$$

et

$$S_{21}^{(q+1)} = S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \quad (2.84)$$

De manière analogue, la comparaison des eq.(2.70) et eq.(2.79) conduit à :

$$S_{11}^{(q+1)} = -S_{12}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \quad (2.85)$$

et

$$S_{12}^{(q+1)} = \left( T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)} \right) Z^{(q)} \quad (2.86)$$

Mais généralement, les équations donnant  $S_{11}$  et  $S_{21}$  ne sont pas utilisées pour calculer (comme nous le verrons plus loin) les amplitudes des ordres diffractés. D'autre part, on peut noter que le calcul des différentes matrices  $S_{12}$  et  $S_{22}$  ainsi que  $Z$  ne font pas intervenir les matrices  $S_{11}$  et  $S_{21}$ , ce qui est un avantage au niveau temps de calcul, puisque nous aurons uniquement 3 expressions à calculer à chaque couche.

En fait, nous venons d'établir les relations de récurrence entre les différentes matrices blocs  $S_{ij}$  pour transporter la solution de la  $q^{ieme}$  couche à la  $q + 1^{ieme}$ . Cet algorithme démarre en prenant  $S_{12}^{(1)} = 0$  et  $S_{22}^{(1)} = I$ , ce qui est cohérent avec le fait, que quand il n'y a pas de couche ( $q = 1$ ), il n'y a aucune réflexion ( $S_{12} = 0$ ) et la transmission est unitaire pour tous les ondes entrantes ( $S_{22} = I$ ).

Ensuite, au travers des différentes couches les relations de récurrence (2.81), (2.83) et (2.86), permettent de calculer les matrices blocs  $S_{12}$  et  $S_{22}$ . Les 4 matrices blocs de la matrice  $T^{(q+1)}$  sont obtenues par la méthode de tir décrite précédemment, ce qui requiert toujours le calcul des images des  $2(2N + 1)$  vecteurs de base.

En utilisant l'Eq.(2.67) et en prenant en compte  $B_n^{(M-1)} = B_n^{(M)}$  et  $A_n^{(M-1)} = A_n^{(M)}$ , la matrice S complète liée à l'empilement des  $M - 2$  couches aura la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(M)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(M-1)} & S_{12}^{(M-1)} \\ S_{21}^{(M-1)} & S_{22}^{(M-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(1)} \\ \vdots \\ A_n^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

La condition d'onde sortante qui spécifie que  $B_n^{(1)} = 0 \forall n$  permet de déterminer les coefficients de Rayleigh:

$$B_n^{(M)} \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) = \sum_{m=1}^{2N+1} S_{12(n,m)}^{(M-1)} A_m^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \quad (2.88)$$

$$A_n^{(1)} = \sum_{m=1}^{2N+1} S_{22(n,m)}^{(M-1)} A_m^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \quad (2.89)$$

Ces équations montrent clairement que la moitié de la matrice S est utile pour résoudre le problème de diffraction. De plus puisque  $A_m^{(M)} = \delta_{m,0}$ , on obtient finalement:

$$\begin{cases} B_n^{(M)} = S_{12(n,0)}^{(M-1)} \exp \left[ -i \left( \beta_n^{(M)} + \beta_0^{(M)} \right) y_{M-1} \right] \\ A_n^{(1)} = S_{22(n,0)}^{(M-1)} \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \end{cases} \quad (2.90)$$

Il est à noter que les relations de récurrence ne font intervenir que des multiplications de matrices et des inversions de matrices carrées dont les dimensions sont  $(2N+1)^2$ , contrairement à d'autres algorithmes (par ex. algorithme de propagation R). D'autre part, et c'était le but de cet algorithme, les 2 blocs de la matrice  $S_{12}$  et  $S_{22}$  sont obtenus sans rencontrer le problème de multiplication de nombres très grands qui engendrent une contamination numérique des résultats. Techniquement, maintenant, la méthode différentielle est présentée, ainsi que l'algorithme de propagation S.

Quelles vont être les modifications apportées au système précédent pour traiter le cas de la sonde venant capter le champ électromagnétique émis par l'objet ?

Nous avons présenté sur la Fig 2.3, un schéma du système complet.

1. Le substrat est composé d'un milieu semi-infini ( $y \in [a, +\infty[$ ) d'indice de réfraction réel  $n_2$ . En fait ce milieu est celui d'un prisme droit ou héli-cylindrique que l'on rencontre dans la géométrie classique du PSTM. Ce milieu sert en général, à rendre le faisceau transmis d'ordre 0 évanescant. Il est à noter que les réflexions multiples qui peuvent avoir lieu sur le côté adjacent et opposé du prisme droit ou sur la partie circulaire du prisme héli-cylindrique ne sont pas prises en compte ici.
2. L'objet, principalement de section carrée dans notre étude est déposé sur le prisme. Son indice de réfraction ( $n_{ob}$ ) peut être quelconque. La taille de l'objet sera comprise entre 10 nm et 100 nm, dimensions sub-longueur d'onde par rapport à la longueur d'onde utilisée ( $\lambda = 632.8nm$ ).
3. La sonde placée au dessus de l'objet sera décomposée généralement en 3 parties :
  - une partie supérieure de section rectangulaire, que l'on appellera partie guidante, pour la raison qui sera exposée par la suite. Cette partie guidante aura une taille latérale de quelques centaines de nanomètres (guides monomodes du chapitre 3) jusqu'à plusieurs dizaines de micromètres (dans le cas de guides multimodes des chapitres 4, 5 et 6). La hauteur de la partie guidante ( $a_1$ ) mesurera de plusieurs microns à une centaine de microns. Il est à noter que dans le cas de la modélisation de sonde réaliste, cette partie guidante sera composée d'une zone coeur et d'une

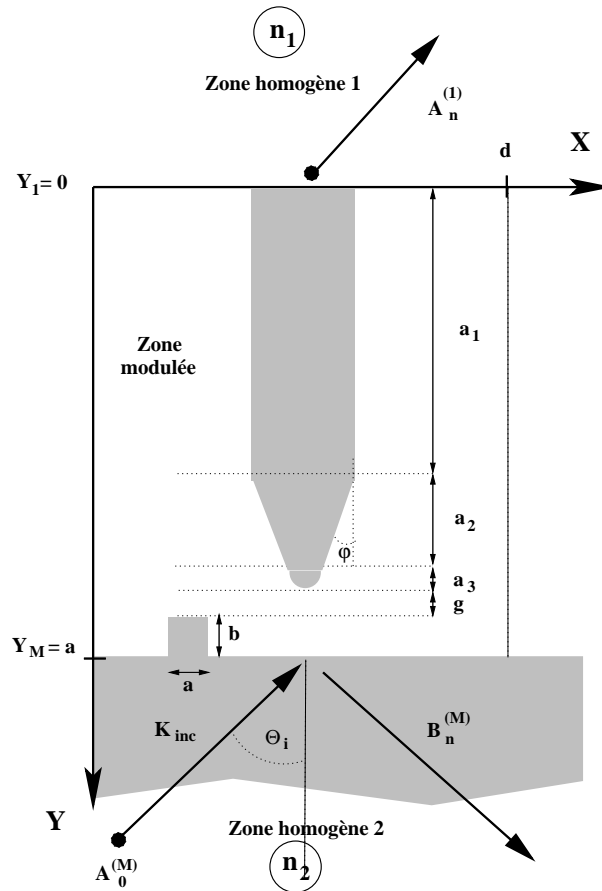


FIG. 2.3: Présentation du système global (substrat-objet-sonde).

zone gaine, l'ensemble pouvant être recouvert d'un matériau métallique, tel que l'or par exemple.

- une partie intermédiaire, appelé 'taper', dont la section est conique ou trapézoïdale de hauteur  $a_2$ . Ce taper sera défini principalement par l'angle  $\varphi$  comme le montre la Fig2.3. Dans le cas d'une partie guidante réaliste, on sera amené à structurer le taper par une partie gaine et une partie coeur. La taille latérale de cette dernière sera soit constante (fibre attaquée chimiquement), soit homothétique par rapport à la section du taper (dans le cas d'une fibre étirée de manière adiabatique).

- une partie inférieure, appelé extrémité ou 'apex', dont la section est un demi-disque de rayon ( $a_3$ ) variant entre 10 nm et 100 nm.

4. On peut d'autre part noter qu'il existera toujours un espace (ou 'gap') entre la sonde et l'objet. Ceci définit une zone homogène, qui sera traitée de manière analytique puisque le développement de Rayleigh y est valide. Ceci permet de gagner une étape de calcul pour cette couche (l'étape de la méthode du tir).

5. Le superstrat est composé d'un milieu semi-infini ( $y \in ]-\infty, 0]$ ) d'indice de réfraction réel  $n_1$ . Dans ce demi-espace, les différents modes propagés par la fibre vont émerger et se diriger vers un détecteur virtuel. Ceci sera expliqué dans le chapitre suivant.

Après avoir présenté le système complet, plusieurs remarques relatives à la méthode de calcul utilisée et à la géométrie du système doivent être faites.

1. La décomposition de Rayleigh dans les 2 zones homogènes permet de décrire directement le champ diffracté sous forme d'ondes homogènes et inhomogènes, d'où une interprétation plus aisée par rapport à d'autres méthodes qui utilisent un développement dipolaire ou multipolaire. Pour la même raison, la reconstruction du champ est rapide dans ces 2 zones et comme nous le verrons dans le chapitre suivant, le calcul de l'intégrale de recouvrement avec les modes propres de la sonde est facilité. Une intégration supplémentaire de la solution au travers du système permet aussi de calculer chacune des composantes du champ électromagnétique dans la zone inhomogène (processus qui peut être assez long si la sonde mesure plusieurs dizaines de microns de longueur).
2. En raison de la méthode du tir présentée précédemment, l'intégration des différents modes de la base finie s'effectuent dans la direction opposée au vecteur d'onde incident. Le temps de calcul au travers du système complet s'en trouve fortement diminué. Par exemple, quand on simulera le mode à hauteur constante (qui sera le seul mode de balayage envisagé dans ce travail), on déplacera l'objet devant la sonde et non l'inverse. En effet, ceci nous permettra de propager qu'une seule fois les modes propres de la base au travers de la sonde et du gap. Ce qui sera un gain de temps appréciable dans le cas d'une sonde de hauteur très importante.
3. D'autre part, en raison de la pseudo-périodicité des composantes du champ électromagnétique, le calcul des modes propres de la base au travers de l'objet ne sera effectué qu'une seule fois pour une position de l'objet devant la sonde, puis le résultat sera multiplié par un terme de "déphasage" pour les différentes positions restantes pour chacun des modes propres
4. Avec toutes ces considérations, le temps de calcul va dépendre de différents paramètres, la période du système qui va influencer sur le nombre de modes nécessaires pour bien décrire le système, le nombre de couches qui va augmenter avec le nombre de modes, et bien sûr la hauteur de la zone modulée qui est représentée en moyenne à 95% par la hauteur de la sonde.
5. De cette manière le temps de calcul pour un système comportant une sonde du type multimode (d'une section de  $30\mu m$  et longue d'une centaine de microns) et d'un objet se déplaçant sur une distance d'une centaine de microns (1025 modes) se divisera en deux parties : les 2/3 du temps de calcul total servent à calculer les modes propres au travers de la sonde et le 1/3 restant à déplacer l'objet devant la sonde. L'estimation du temps de calcul est dans ce cas de 10 à 12 jours suivant le nombre de

points de balayage de la sonde devant l'objet. Dans le cas d'une sonde monomode de 200 à 300 nm de large pour une hauteur de  $10\mu m$  (avec 513 modes pour une période de  $40\mu m$ ), le calcul s'effectuera en 6 heures. Il est à noter que les calculs ont été effectués sur machine DEC ES40 (667Mhz), utilisé en mode séquentiel, avec des programmes écrits en Fortran 90.

## 2.3 Système: objet sub-longueur d'onde avec sonde

Avant de montrer l'effet des paramètres numériques : le nombre de modes ainsi que le nombre de couches utilisés lors du calcul du champ électromagnétique collecté par la sonde, nous allons montrer comment calculer l'intensité lumineuse se propageant suivant les modes propres de la partie guidante de la sonde et qui sera transmise au détecteur placé derrière la sonde.

### 2.3.1 Calcul du signal collecté par la sonde

Le signal que nous allons calculer est le flux du vecteur de Poynting émis au travers de la section de la sonde, et ceci pour différentes positions de la sonde devant l'objet. Si la partie rectangulaire de la sonde est suffisamment longue, celle-ci se comportera comme un guide d'onde plan. Pour l'instant le calcul effectué par la méthode différentielle, nous fournit un nombre fini d'ondes propagatives et évanescentes transmises dans la zone 1 d'indice de réfraction  $n_1$ . Pour la suite du calcul, nous ne tiendrons pas compte des composantes évanescentes qui décroissent dans le milieu  $n_1$  et qui ne peuvent atteindre le détecteur situé en champ lointain par rapport à l'extrémité supérieure de la sonde. Pour les composantes propagatives, une partie provient de la sonde (partie guidante), une autre partie est directement diffusée par l'objet ou par la sonde. Cependant lors d'une expérience, c'est le champ transmis au travers des modes guidés de la fibre qui seul est détecté. Par conséquent, et dans le but d'être conforme aux considérations expérimentales d'un SNOM en mode collection ou d'un PSTM, nous devons séparer dans nos calculs, le champ qui arrive dans la zone 1 via les modes guidés de la sonde et d'autres contributions. Le raisonnement qui est tenu ici est valable pour les différents types de sondes présentées dans ce travail : sondes monomodes et multimodes, métallisées ou non. A partir de ces considérations le champ électrique total qui arrive dans la zone homogène 1 (voir Fig.2.3), a la forme suivante :

$$E^{(1)}(x, y) = \sum_{n \in \{rad\}} [A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}y)] \exp(i\alpha_n x) \quad (2.91)$$

où  $\{rad\}$  est l'ensemble de tous les modes radiatifs transmis. Le champ qui arrive dans la zone 1 via une sonde multimode peut être exprimé à travers ses modes propres de la manière suivante :

$$E_p^{(1)} = \sum_{k=1}^K \rho_k E_{zk} \exp(-i\gamma_k y), \quad (2.92)$$

où  $E_{zk}$  est la composante selon  $z$  du champ électrique du  $k^{\text{ième}}$  mode propre de la sonde,  $\gamma_k$  la constante de propagation du mode,  $\rho_k$  caractérise le taux de couplage du champ avec les modes guidés de la sonde, et  $K$  le nombre total de modes propres de la sonde. Le coefficient  $\rho_k$  dépend des indices de réfraction des différents milieux de la sonde ainsi que de sa largeur.

En prenant en compte toutes ces considérations, le champ total dans la zone 1 peut être écrit selon la forme suivante :

$$E^{(1)}(x, y) = E_p^{(1)} + E_c^{(1)}(x, y) \quad (2.93)$$

où  $E_c^{(1)}(x, y)$  est le champ qui arrive dans la zone 1, mais qui n'est pas transmis par les modes propres de la sonde.

Pour calculer  $\rho_k$ , on multiplie l'équation (2.93) par  $E_{zm}^* \exp(i\gamma_m y)$  puis on intègre sur une période  $d$ . On suppose que la période  $d$  retenu du système 2 D est suffisamment grande pour que les 2 cellules de part et d'autre du système étudié ne viennent pas perturber ce dernier. Ceci implique que le recouvrement du champ électrique peut être exprimé de la manière suivante:

$$\exp(i\gamma_m y) \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(1)} E_{zm}^* dx = \rho_m \int_0^d |E_{zm}|^2 dx + \exp(i\gamma_m y) \int_0^d E_c^{(1)} E_{zm}^* dx \quad (2.94)$$

et ceci  $\forall m \in [1, K]$ .

L'orthogonalité des modes propres du guide implique que  $\int_0^d E_{zm} E_{zk}^* dx = 0$ .

Le dernier terme de l'eq. (2.94) décrit le recouvrement dans la zone 1 du champ diffusé par l'objet et la sonde, mais qui n'est pas couplé aux modes guidés de la sonde. Nous allons montrer dans les chapitres 4 et 5 que dans le cas d'un signal collecté par une sonde monomode ou multimode, ces termes interviennent faiblement (de l'ordre de 2% à 3% au maximum). Ce terme peut donc être négligé et l'expression (2.94) réduite à :

$$\rho_m \approx \frac{\exp(i\gamma_m y) \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(1)} E_{zm}^* dx}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx}. \quad (2.95)$$

Par conséquent, le champ qui se propage dans le  $m^{\text{ième}}$  mode guidé est donné par :

$$e_{zm} \approx \frac{\sum_{n \in \{rad\}} \int_0^d E_{zm}^* E_n^{(1)} dx}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx} E_{zm} \quad (2.96)$$

Le flux moyen  $\phi_m$  du  $m^{i\grave{e}me}$  mode propre dans le guide d'onde est donné par l'intégrale de  $e_{zm}$  à travers la section transversale (suivant l'axe  $oy$ ) de la composante du vecteur de Poynting :  $\phi_m = - \int_0^d S_{ym} dx$ . Le vecteur de Poynting, en polarisation TE s'exprime par :

$$S_{ym} = \frac{1}{2} e_{zm} h_{xm}^* = - \frac{\gamma_m}{2\omega\mu_0} |e_{zm}|^2 \quad (2.97)$$

L'expression finale du flux transmis à travers le guide d'onde par le  $m^{i\grave{e}me}$  mode propre est :

$$\phi_m \approx \frac{\gamma_m}{2\omega\mu_0} \frac{\left| \sum_{n \in \{rad\}} \int_0^d E_n^{(1)} E_{zm}^* dx \right|^2}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx} \quad (2.98)$$

Pour une sonde multimode, le signal total collecté est la somme sur tous les modes propres :  $\phi_{tot} = \sum_{m=1}^K \phi_m$ .

### 2.3.2 Optimisation des paramètres numériques: cas du PSTM

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés au cas d'un objet sub-longueur d'onde unique déposé sur le substrat en l'absence de sonde. Ce type de calcul a déjà été effectué de multiples façons, mais comme ce résultat va nous servir de comparaison tout au long de ce travail, ils nous a semblé important de le retrouver avec la méthode décrite ci-dessus. En l'absence de sonde, la hauteur de la zone modulée se résume à la hauteur de l'objet, donc à une fraction de longueur d'onde. On pourrait penser qu'il est inapproprié d'utiliser une méthode relativement lourde pour effectuer ce calcul 'relativement simple', cependant comme nous le verrons sur le résultat, quand l'objet déposé sur le substrat est éclairé en réflexion totale, des interactions entre les cellules voisines peuvent apparaître si la période n'est pas suffisante pour isoler l'objet. Dans ces conditions, la période du système doit être relativement élevée, et donc le nombre de modes utilisés pour bien décrire le système aussi. Dans ce cas, les ordres évanescents les plus élevés ont une portée très faible, et cette situation impose un algorithme de propagation du type S. Dans une seconde partie, nous introduirons au dessus de l'objet une sonde de forme simple, afin de voir uniquement l'effet des 'paramètres numériques'; c'est-à-dire voir comment le nombre de modes, et le nombre de couches influent sur l'intensité diffractée par le système global, et ceci uniquement pour une position donnée de la pointe par rapport à l'objet.



### 2.3.2.1 Système 1: objet sub-longueur d'onde sans sonde

La diffraction de l'objet seul a été un des premiers calculs effectués [Carminati 96] afin de connaître la répartition du champ électromagnétique émis par l'objet [Weeber *et al.* 96]. Pour notre calcul, nous avons pris un objet de section carrée et de taille relativement élevée par rapport à la longueur d'onde :  $100 \times 100(nm^2)$ . L'objet est illuminé en réflexion interne, avec un angle d'incidence  $\theta = 60^\circ$ . La longueur d'onde est  $\lambda = 632.8nm$ , l'indice de réfraction de l'objet est  $n_2 = 1.458$  comme le substrat, le tout baignant dans l'air.

En ce qui concerne le champ lointain, nous avons calculé l'efficacité totale des ordres transmis en fonction du nombre de modes, et ceci pour deux périodes :  $24\mu m$ , et  $48\mu m$ . Les résultats sont rassemblés dans le tableau suivant (2.1) où l'efficacité totale transmise ( $T(\times 10^{-4})$ ) ainsi que sa variation relative quand le nombre de modes est doublé ( $(\frac{T_{i+1}-T_i}{T_i})$ ) sont données en fonction de nombre de modes  $2N + 1$ .

$2N + 1$	257	513	1025	2049
$d_1 = 24\mu m$	4.370 (31%)	4.476 (2%)	4.480 (0.1%)	4.480 (0.0%)
$d_2 = 48\mu m$	1.503 (55%)	2.187(30%)	2.241 (3%)	2.243 (0.1%)

TAB. 2.1: Le coefficient d'efficacité en transmission pour les deux périodes  $d_1 = 24\mu m$  et  $d_2 = 48\mu m$  pour différentes valeurs de  $2N + 1$ .

Nous confirmons sur ce tableau, que plus la période est grande, plus il est nécessaire d'augmenter le nombre de modes pour bien décrire le système. Il en est de même pour la variation relative au niveau de la transmission. Nous voyons que pour des périodes de  $24\mu m$  et  $48\mu m$ , 513 modes et 1025 modes respectivement suffisent pour obtenir une efficacité en transmission constante à moins de 0.1%, valeur relative suffisante par rapport aux précisions expérimentales que l'on peut atteindre à l'heure actuelle. Il est à noter, que ces calculs ont été effectués avec un nombre de couches égal à 5. Dans ces conditions, l'erreur relative sur la conservation de l'énergie en champ lointain est de l'ordre de  $10^{-11}$ . Il est à noter que pour obtenir une erreur de l'ordre de  $10^{-15}$  à  $10^{-16}$  (de l'ordre de l'erreur de la machine en double précision), le nombre de couches doit être augmenté en fonction du nombre de modes utilisés.

En ce qui concerne l'effet du nombre de modes en champ proche, nous avons représenté (Fig.2.4) l'intensité liée au champ électrique ( $I = \sum_{m=1}^{2N+1} E_m E_m^*$ ), en considérant tous les termes aussi bien radiatifs qu'évanescents et ceci à une altitude donnée de  $110nm$  au dessus du dioptre substrat-air.

Pour le champ proche on a vérifié que lorsque  $2N + 1$  et  $M$  sont choisis pour obéir au critère de convergence en champ lointain décrit précédemment, la distribution de champ est invariante quand on augmente le nombre de modes ou le nombre de couches. Il est

important de noter que le choix de la période  $d$  ne relève pas que de critère de convergence en champ proche, nous souhaitons que chaque cellule de notre système périodique puisse être considérée comme unique sur le substrat. En d'autres termes les cellules doivent être "indépendantes". Pour chaque valeur de la période  $d$  on se place dans les conditions de convergence en champ lointain. La Fig.2.4, illustre le choix de la période, où l'on a choisi de présenter la distribution de l'intensité du champ électrique, pour  $d = 12, 24$  et  $48(\mu m)$ . On remarque que lorsque  $d$  est petit on observe des oscillations dans les courbes aux extrémités des cellules. Ces oscillations tendent à disparaître lorsque  $d$  est assez grand pour que le champ calculé dans chaque cellule ne soit pas perturbé par les objets de cellules voisines.

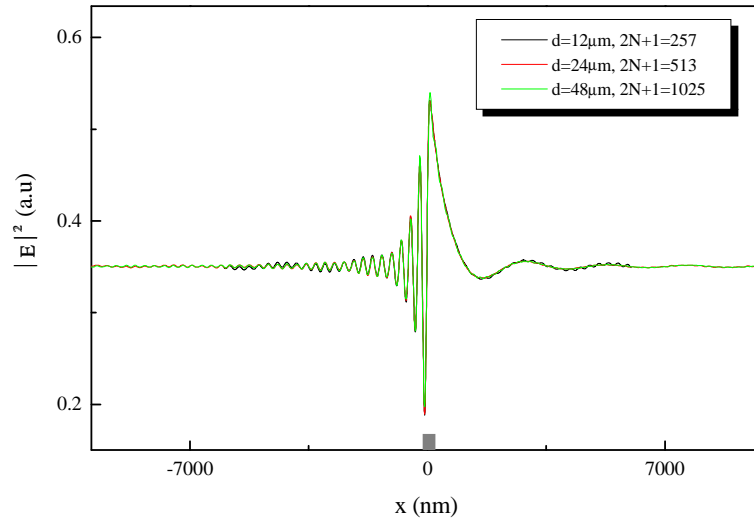


FIG. 2.4: Distribution du champ électrique pour une période de  $12\mu m$  (257 modes),  $24\mu m$  (513 modes) et  $48\mu m$  (1025 modes), calculée à une distance  $y_0 = 10nm$  au dessus de l'objet de taille  $100 \times 100(nm^2)$ .  $\theta = 60^\circ$ ,  $\lambda = 632.8nm$ .

Discutons maintenant de l'origine physique de la distribution d'intensité en champ proche sur la figure ci-dessus. La distribution calculée en respectant les critères de convergences précédents montre un pic central asymétrique qui résulte de la diffraction par un objet de taille sub-longueur d'onde éclairé d'une manière asymétrique. Nous remarquons aussi un phénomène d'oscillations de part et d'autre du pic central, qui s'étend d'ailleurs sur une très grande distance. Ces oscillations apparaissent avec différentes périodes, et sont dues aux interférences entre les différentes ondes diffractées par l'objet et la composante parallèle de l'onde transmise dans la partie air située au dessus de l'objet [Greffet *et al.* 95]. La portée des oscillations est d'ailleurs tellement importante, que les oscillations de petite période (principalement à gauche de l'objet) se retrouvent à droite (en raison de la périodicité du système), sur une distance de  $7$  à  $8\mu m$ . La même remarque peut être faite

pour les oscillations de grande période. Si nous représentons l'intensité diffractée par le même objet sur une période de  $48\mu m$  avec 1025 modes, ce phénomène de repliement des oscillations disparaît. Dans ces conditions, les oscillations de faibles périodes s'étendent uniquement à gauche de l'objet sur une distance de  $18\mu m$  à  $20\mu m$  et de même pour les oscillations de grande période. Ceci a été vérifié par une autre méthode de calcul : la méthode des dipôles couplés [Chaumet *et al.* 98, Rahmani et de Fornel 96], qui est une méthode aperiodique, et où la décomposition sous forme d'ondes planes ne peut être soupçonnée, puisque cette dernière est formulée de manière radicalement différente de la méthode différentielle.

Loin de l'objet (latéralement), l'intensité diffractée est quasi-constante, et égale à  $I \approx 0.35$  pour un champ électrique incident d'amplitude 1. Cette valeur de l'intensité correspond à l'amplitude du champ évanescent au dessus d'un dioptre verre-air éclairé en réflexion totale interne. Cette expression rappelée ci-dessous [Salomon *et al.* 91], a la forme suivante :

$$I = |E|^2 = E_{eva} \cdot E_{eva}^* = \frac{(2n_2 \cos \theta_i)^2}{n_2^2 - n_{air}^2} \exp(2kz) \left\| E_{0x}^i \right\|^2, \quad (2.99)$$

où  $k = \frac{2\pi}{\lambda_0} \frac{1}{\sqrt{n_2^2 \sin^2 \theta_i - n_{air}^2}}$ , et  $E_{eva}$  est le champ électrique de la seule composante évanescente existante. En dehors de la partie constante, la variation d'intensité est liée à la présence de l'objet.

Pour conclure cette partie, nous avons réussi à décrire la distribution du champ électromagnétique diffracté par un objet en utilisant une méthode qui est optimisée pour traiter les systèmes périodiques, et de ce fait nous avons minimisé voire éliminé les interactions entre les cellules voisines contenant le même motif (l'objet seul). Nous voyons qu'avec l'algorithme de propagation S couplé à la méthode différentielle, il est possible de traiter correctement ce type de problèmes.

Ceci va-t-il être différent dans le cas d'un système plus complexe, comportant un objet sub-longueur d'onde et une sonde de taille sur-longueur d'onde?

### 2.3.2.2 Système 2: objet sub-longueur d'onde avec sonde

Dans cette section, nous étudions un système composé d'un objet (celui que nous avons décrit dans la section précédente) et d'une sonde. Pour simplifier notre propos, qui est ici de voir uniquement l'effet des paramètres numériques sur un système complexe, nous allons restreindre la sonde à sa partie rectangulaire. L'effet du taper et de l'apex sera repris largement dans les chapitres suivants. Pour la représentation du système, on peut se reporter à la Fig.2.3, en faisant abstraction du taper et de l'apex. Les paramètres au niveau de l'éclairage et de l'objet sont les mêmes que dans la section précédente, et la sonde est caractérisée par un diamètre de  $200nm$ , une hauteur de  $a_1 = 3,6\mu m$  et un indice de réfraction égal à celui du substrat ( $n_{sonde} = 1,458 = n_2$ ).

Nous allons tout d'abord examiner, les paramètres numériques liés à la méthode de calcul : nombre de modes et nombre de couches. Nous travaillons dans le mode à hauteur constante, et donc l'extrémité de la sonde se déplace à une distance constante du dioptre substrat-air comme dans le cas du point matériel présenté dans la section précédente.

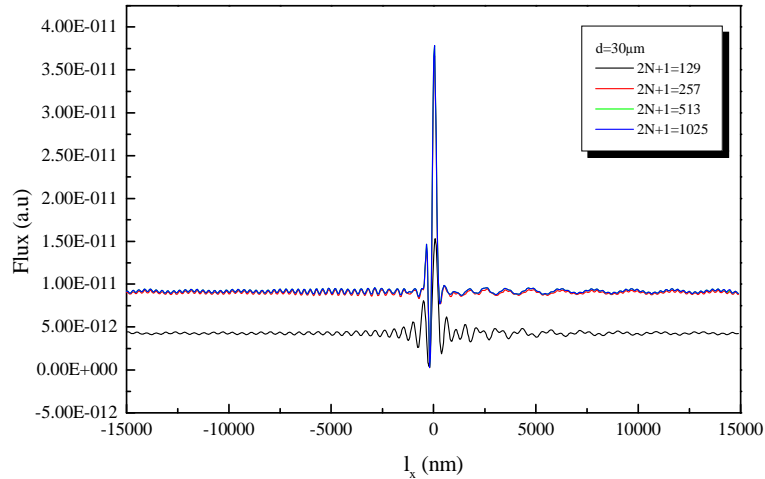


FIG. 2.5: Effet du nombre de modes sur le système sonde-objet, pour un nombre de couches donné et une période donnée.

Sur la Fig2.5, nous avons représenté le flux transmis au travers de la sonde décrite par les paramètres précédents. En raison des indices de réfraction de la partie rectangulaire, de son environnement, et de son diamètre un seul mode peut être excité et se propager comme nous le verrons plus en détails dans le chapitre suivant. Nous voyons que comme dans le cas précédent (objet unique), la convergence du flux transmis s'établit pour un nombre de modes équivalent, soit 513 modes pour une période donnée de  $30\mu m$  (et  $M = 50$ ). Sans rentrer dans les détails, comme nous le ferons dans le chapitre suivant, les courbes présentent de part et d'autre de la position verticale de la sonde au dessus de l'objet des oscillations de petite période sur la partie gauche de la courbe, et de plus grande période sur la partie droite mais avec une périodicité augmentant au fur et à mesure que la sonde s'éloigne latéralement de l'objet. Nous pouvons remarquer que le passage de la sonde à la verticale de l'objet engendre un flux transmis très important, et plus confiné latéralement que pour l'objet seul, et nous voyons l'effet de repliement (petites oscillations à droite) dû à la périodicité du système trop faible dans ce cas là.

Sur la Fig 2.6, nous avons fait évoluer le nombre de couches afin de déterminer son effet sur le flux transmis au travers du système sonde-objet. Il est possible, en connaissant les paramètres du système, de donner une estimation du nombre de couches pour un

système donné, bien qu'une vérification à posteriori soit fortement conseillée. En effet, comme dans le cas de l'objet seul, nous avons fait évoluer la période du système afin de comparer la distribution du flux lumineux émergent de la sonde. Nous avons représenté sur la figure (Fig2.7), le flux transmis pour 4 périodes différentes, de  $10\mu m$  à  $40\mu m$ , et ceci avec un nombre de couches et un nombre de modes appropriés. Comme nous pouvons l'observer à partir de ces courbes, quelque soit la période du système nous obtenons des flux d'énergie comparables à travers la sonde. Nous remarquons qu'en augmentant la période nous éliminons le repliement des oscillations qui se trouvent aux extrémités gauche et droite des courbes. Notons que la période trouvée qui permet de quasiment découpler les différents systèmes est à peu près la même que celle obtenue avec une structure beaucoup moins haute (objet seul). Ceci peut être lié, d'une part à la faible diffusion en champ lointain de l'objet et au fait que la sonde et l'objet ont des dimensions latérales comparables.

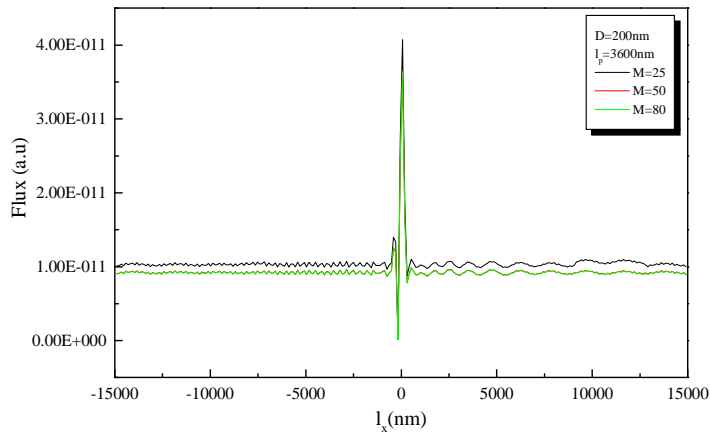


FIG. 2.6: Effet du nombre de couches pour un nombre de modes donnés et une période donnée.

Nous verrons dans les chapitres suivants que suivant la taille et le type de sonde, on aboutit à une évaluation de cette période, qui à notre connaissance ne peut être déterminée qu'au cas par cas. Notons que cette façon de procéder pour rendre d'une certaine manière le système apériodique, sera appliquée dans tous les types de systèmes que nous allons étudier par la suite. Mais généralement, plus la taille de la sonde sera importante, plus la période du système et donc le nombre de modes à prendre en compte augmentera. Bien que ceci ait une répercussion considérable sur le temps de calcul, il sera néanmoins possible de traiter le cas d'une sonde de taille relativement importante grâce à cette méthode.

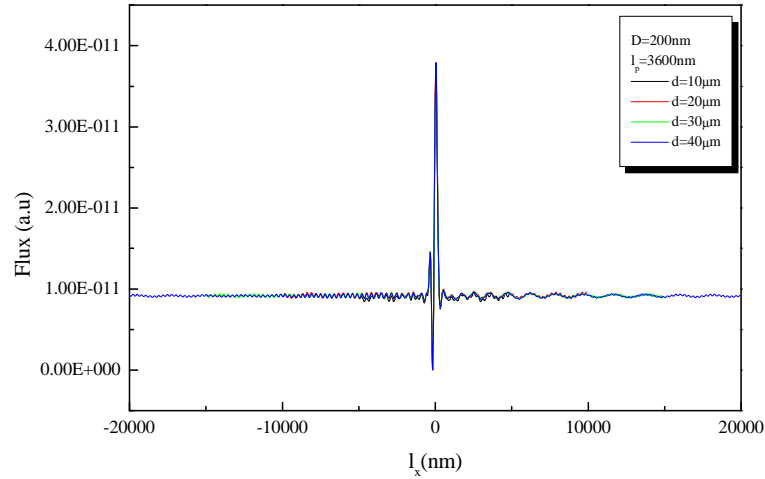


FIG. 2.7: Effet de la période pour un nombre de modes et un nombre de couches suffisant  $M = 50$ .

## 2.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre nous avons exposé le principe de la méthode différentielle ainsi que son amélioration principale : l'algorithme de propagation S-matrice. Ce dernier permet d'étendre le champ d'application de la méthode différentielle à des objets sur-longueur d'onde. Le but de cette étape était de montrer qu'il était possible d'utiliser cette méthode pour traiter un système global (substrat-sonde-objet), en tenant compte, des réflexions multiples existant entre les divers composants. Bien que n'ayant analysé que la configuration SNOM-collection, type PSTM (éclairage en réflexion totale interne), nous pensons que cette méthode est applicable à d'autres configurations. Nous avons aussi précisé les conditions à respecter pour avoir la possibilité de décrire correctement un système unique sonde-objet à partir d'une méthode périodique. A partir de ces résultats, il est maintenant possible d'analyser l'effet des différents paramètres de la sonde sur le champ électromagnétique diffracté par le système global du type PSTM.

Le cas de la polarisation p n'a pas été traité ici. Dans ce cas, la méthode différentielle est encore applicable ainsi que l'algorithme S-matrice, cependant une nouvelle factorisation des produits des séries de Fourier tronquées est indispensable pour augmenter de manière significative la rapidité de convergence du calcul pour un nombre de modes donnés [Li 96, Gérard 04]. De même, une géométrie tridimensionnelle du système complet peut être traitée avec cette méthode, mais la place mémoire ainsi que le temps de calcul deviennent prohibitifs. Une évolution des ordinateurs ainsi que la parallélisation des programmes (par exemple langages MPI ou Open MP) permettra de simuler des systèmes complets et réalistes en 3 dimensions en prolongement du travail présenté dans cette thèse.



## Chapitre 3

# Simulation d'images PSTM en mode à hauteur constante avec une sonde monomode

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au cas du PSTM lorsque le champ proche diffusé par un échantillon est collecté par une sonde monomode puis couplé au mode propre qui se propage dans la sonde jusqu'au détecteur. Nous nous sommes surtout intéressés à l'étude des images optiques réalisées avec une sonde monomode. Nous montrerons les premières applications de notre modèle global dans l'étude de l'interaction sonde-objet en introduisant les effets de la forme de la sonde, de la distance sonde-objet, de l'angle d'incidence ainsi que de l'indice de réfraction de l'objet. La fonction de transfert et la question de la passivité de la sonde détectrice dans le PSTM seront aussi abordées.

### 3.1 Position du Problème

Dans toutes nos simulations nous éclairons l'objet par réflexion totale interne au niveau du substrat et nous considérons deux milieux d'indices de réfraction respectifs  $n_1$  et  $n_2$  où  $n_1 > n_2$  (voir Fig3.1(a)). L'onde plane arrive à l'interface entre les deux milieux sous un angle  $\theta$  supérieur à l'angle critique  $\theta_c$ , elle est donc totalement réfléchi. Par conséquent le champ électromagnétique dans le milieu  $n_2$  est une onde évanescente [de Fornel 98], son amplitude décroît exponentiellement avec la distance à l'interface. L'intensité du champ transmis dans le milieu 2 en fonction de la distance  $y$  par rapport à l'interface, a pour expression [Salomon *et al.* 91]:

$$I(y) = I_0 \exp\left(-\frac{2y}{d_p}\right) \quad (3.1)$$

avec



$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi\sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta - n_2^2}} \quad (3.2)$$

$I_0$  est l'intensité incidente à l'interface,  $d_p$  la profondeur de pénétration, qui traduit la rapidité de la décroissance, division par  $e^2$  du champ évanescent lorsque l'on s'éloigne de l'interface. Cette grandeur est liée aux indices de réfraction des deux milieux, à la longueur d'onde et à l'angle d'incidence. L'amplitude du champ est très sensible aux valeurs de  $d_p$ .

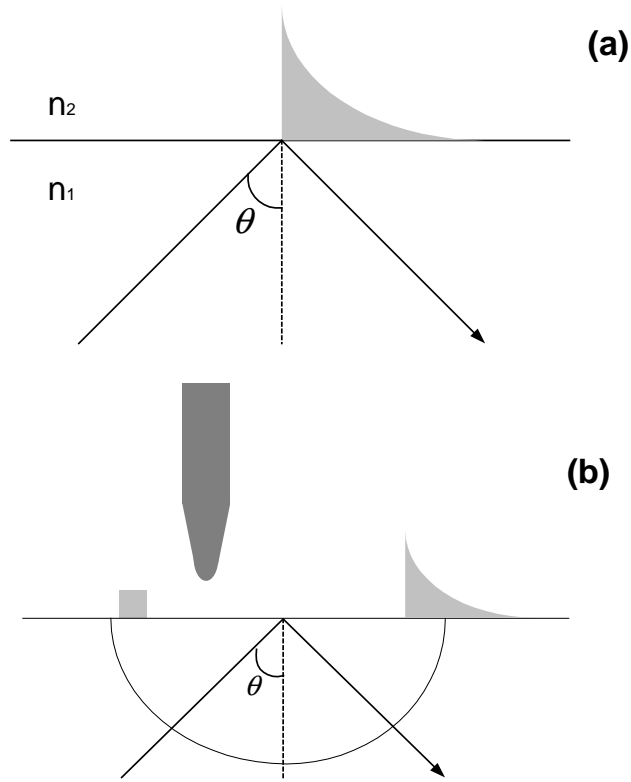


FIG. 3.1: (a) Réflexion totale et confinement de l'onde évanescente, (b) Principe de détection du champ proche par une sonde.

La présence d'un objet sur le substrat, entraîne une frustration locale et partielle de la réflexion totale.

Dans le système réel que nous étudions, l'objet transparent est éclairé en réflexion totale interne (Fig3.1(b)), le champ proche est détecté au moyen d'une sonde monomode, qui collecte une partie des ondes évanescentes et progressives, puis les convertit en ondes radiatives qui se propagent jusqu'au détecteur.

Les paramètres opto-géométriques du système sonde-objet ont été déjà présentés dans le chapitre 2 (section 2.2.2). Sur la Fig.3.2 nous reproduisons ce système avec plus de détails relatifs à ce chapitre (ex. les sens de déplacement latéral de la sonde).

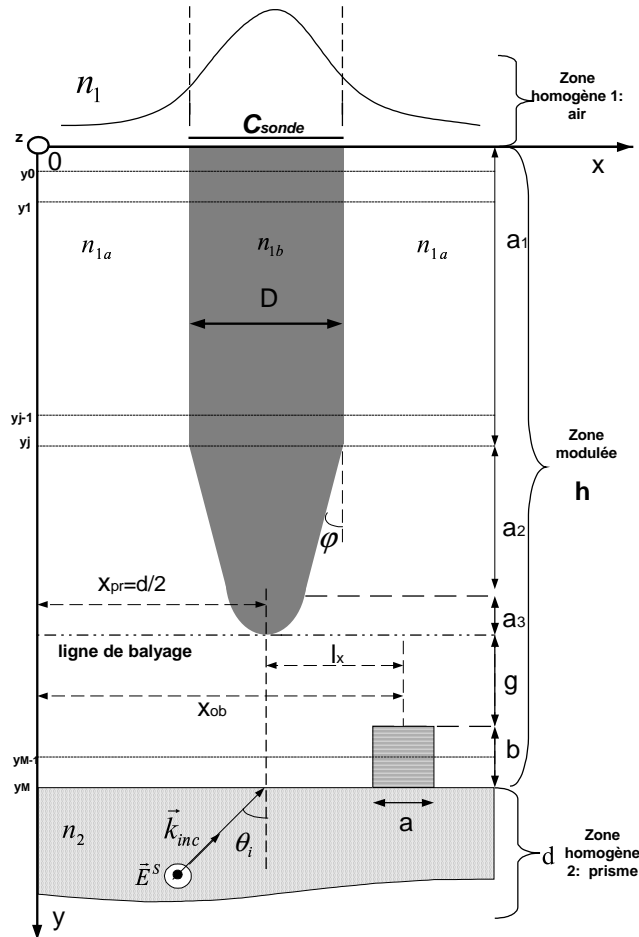


FIG. 3.2: Schéma de la configuration PSTM à 2 dimensions.

### 3.2 Installation du mode guidé

Maintenant nous allons étudier des images optiques<sup>1</sup> en étudiant les influences des différents paramètres physiques de la sonde : sa longueur et sa forme géométrique, car ils

<sup>1</sup>Dans notre travail théorique, l'image optique est définie comme la variation de l'intensité du flux transmis dans la sonde quand elle balaye une ligne passant au-dessus de l'objet et en restant à hauteur constante (évaluée à partir du substrat).

jouent un rôle important dans la détection en champ proche.

Dans nos calculs numériques, nous utilisons une sonde de taille finie, dont la partie guidante est tronquée. De ce fait, la lumière qui se propage dans le corps de la fibre, se réfléchit sur la section supérieure limitant la fibre et une partie du signal se trouve renvoyée vers la surface de l'échantillon. Ce ne sont cependant que quelques pour cent du signal qui sont réfléchis en bout de fibre. Pour étudier l'effet de la longueur de la fibre dans l'installation du mode fondamental de la fibre, nous avons considéré le cas d'une sonde rectangulaire simple (sans apex ni taper) devant le substrat plan <sup>2</sup>.

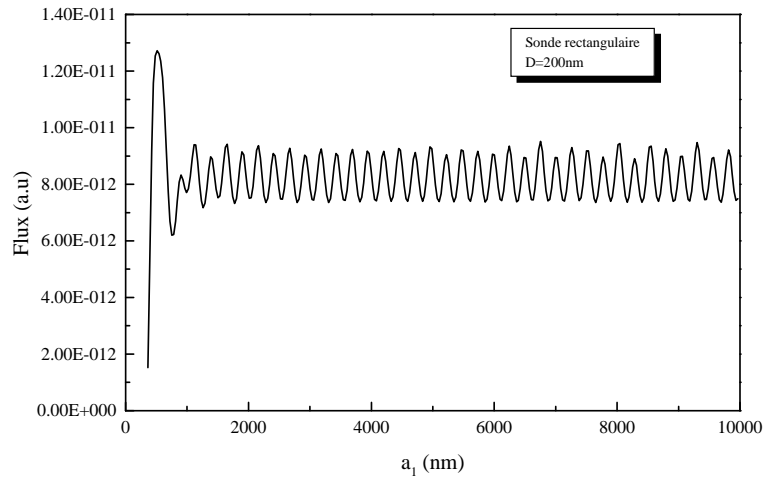


FIG. 3.3: Variation du signal transmis en fonction de la longueur  $a_1$  de la partie rectangulaire de la sonde.

Nous présentons le flux transmis à travers la sonde rectangulaire en fonction de la variation de la longueur de la sonde  $a_1$  sur la Fig. 3.3. Sur cette courbe, on distingue deux zones : la première zone, au début de la courbe, dans l'intervalle  $[10nm, 1\mu m]$ , montre une forte augmentation du flux transmis avant de redescendre autour de la valeur moyenne. Dans ce domaine, la sonde de petite taille se comporte comme un objet diffractant, elle ne guide pas le champ diffusé par l'objet, du fait que son mode fondamental n'est pas encore installé. Dans la deuxième zone, à partir de  $a_1 = 1\mu m$ , le signal commence à osciller d'une manière périodique autour d'une valeur constante. La principale origine de ces oscillations est la réflexion de la lumière transmise à chaque extrémité de la sonde. En effet, le signal détecté peut être considéré comme la somme de la lumière transmise et des multiples réflexions à chaque extrémité. Effectivement, une partie du signal collecté arrive dans la zone 1, alors que l'autre partie est réfléchie puis se propage en sens inverse à travers la sonde jusqu' à la deuxième extrémité. Ensuite, une partie de cette lumière est

<sup>2</sup>A notre connaissance aucune étude théorique ou expérimentale n'a prouvé qu' au delà d'une certaine longueur de la fibre, on a la même intensité qui arrive au détecteur.

aussi partiellement réfléchi et se propage à nouveau jusqu'à la zone 1 et ainsi de suite. Le signal transmis est maximum quand ces deux termes sont en phase. La période de ces oscillations dépend de la constante de propagation  $\beta$  du mode fondamental. Pour notre étude, cette courbe est importante, car elle nous permet d'estimer la longueur de sonde à partir de laquelle le mode guidé (ou les modes guidés dans le cas d'une sonde multimode) est installé dans la sonde. Cette étude indique qu'il est suffisant de considérer une sonde de quelques micromètres de longueur pour que le couplage entre le champ et le mode guidé de la sonde soit pris en considération de façon réaliste.

Nous allons maintenant, étudier l'image optique collectée par une sonde rectangulaire quand elle balaye à hauteur constante un objet sub-longueur d'onde. Le diamètre de la sonde rectangulaire est maintenu à  $D = 200nm$  comme avant, et nous choisissons une longueur de sonde de  $3600nm$ , pour laquelle nous savons à partir de la Fig. 3.3, que le mode guidé est bien installé. La dépendance du flux transmis en fonction de la position relative sonde-objet est présentée sur la Fig. 3.4, où  $l_x = x_{pr} - x_{ob}$  est la distance entre l'axe de la sonde et l'axe de l'objet. Le signe de  $l_x$  est positif quand la sonde balaye à droite de l'échantillon et négatif quand elle balaye à gauche.

Le signal détecté montre un pic quand la sonde passe au-dessus de l'objet. Quand la sonde est latéralement éloignée de l'objet, la valeur du signal est égale à la valeur moyenne du signal collecté en l'absence de l'objet (Fig. 3.3), ce qui confirme que ce pic est bien lié à la diffusion de l'objet. Les faibles oscillations observées de part et d'autre du pic principal ont une période qui augmente avec la distance à l'objet, contrairement au cas où la sonde n'est pas prise en compte dans les calculs (voir Fig. 2.4). En comparant la courbe du signal en présence de la sonde et la courbe de la distribution du champ proche (Fig. 2.4), on constate que pour le cas de l'objet sans sonde, la distance latérale des oscillations est plus grande par rapport aux oscillations qui apparaissent dans la courbe du signal collecté par la sonde. Cette distance est de l'ordre de  $10 \mu m$ .

A partir de maintenant nous considérons seulement des longueurs de sonde qui correspondent à des minimum de l'intensité du flux transmis (voir Fig. 3.3). Nous présentons sur la courbe rouge de la Fig. 3.4, le signal détecté avec le même objet que la courbe noire, mais la longueur de la sonde est légèrement augmentée, elle est prise égale  $a_1 = 4000nm$ . Comme nous pouvons l'observer, l'allure des courbes est identique, mais la valeur moyenne du signal décroît dans tout le domaine de balayage. Ce comportement peut être expliqué quand on observe attentivement la courbe de la Fig. 3.3, qui montre les oscillations du flux transmis quand la longueur de la sonde varie. Pour confirmer on considère une autre longueur de sonde  $l_p = a_1 = 6815 (nm)$  qui correspond aussi à une valeur minimum du flux transmis (courbe verte), la courbe du signal collecté est identique à la courbe du signal calculée pour  $l_p = 4000nm$ . Donc l'intensité collectée est bien en accord avec les prédictions déduites de la Fig. 3.3.

Le fait que nous détectons le même signal avec deux longueurs différentes de sonde

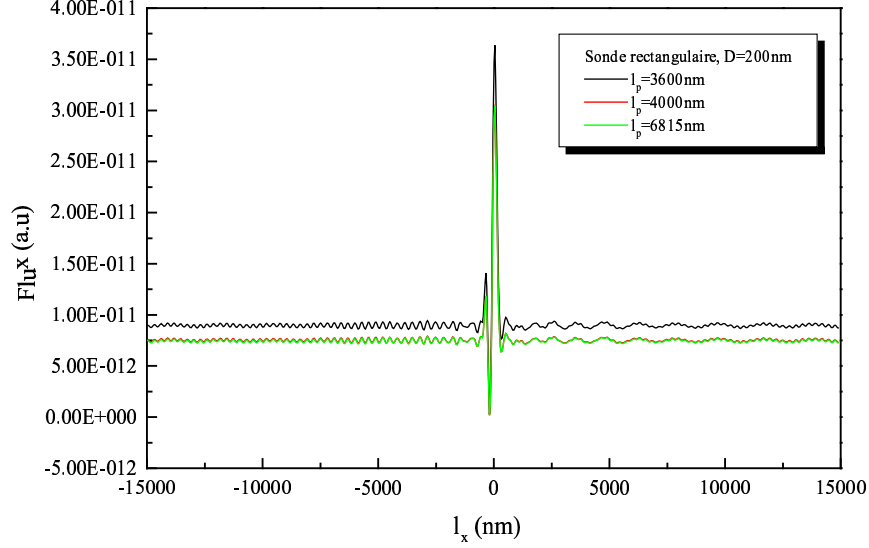


FIG. 3.4: Variation du signal transmis en fonction des positions de la sonde quand elle balaye à hauteur constante le système objet-substrat pour différentes longueurs de sonde : (a)  $l_p = 3600nm$ , (b)  $l_p = 4000nm$  et (c)  $l_p = 6815nm$

correspondant à des valeurs minimum est un des grands avantages de notre modèle. Ceci signifie que si le mode fondamental de la sonde est installé pour une longueur de sonde donnée, il suffira de prendre cette longueur pour calculer le signal collecté par la sonde. Ceci nous aide à réduire le temps de calcul, car il suffit de choisir la sonde la plus courte et qui correspond à un minimum, et par conséquent la zone modulée sera réduite en taille.

### 3.3 Influence de la forme de la sonde

Nous allons maintenant étudier de façon plus systématique les effets liés à la forme de l'extrémité de la sonde. L'influence de la forme de l'extrémité de la sonde dans la formation de l'image en PSTM et/ou en SNOM est l'une des questions courantes qui se pose en optique de champ proche [Bozhevolnyi et Vohnsen 96, Wang *et al.* 04]. Cette question reste aujourd'hui sans réponse définitive. Dans notre modèle global, la méthode employée permet d'étudier l'influence de la forme de la sonde sans aucune approximation sur le système sonde-objet. Nous avons considéré les trois formes de sondes présentées sur la Fig. 3.5.

forme 1:  $a_2 = 0nm$ ,  $a_3 = 100nm$ .

forme 2:  $a_2 = 284nm$ ,  $a_3 = 50nm$ , et  $\varphi = 10^0$ .

forme 3:  $a_2 = 510nm$ ,  $a_3 = 10nm$ , et  $\varphi = 10^0$ .

$D$  reste constant :  $200nm$  dans tous les cas.

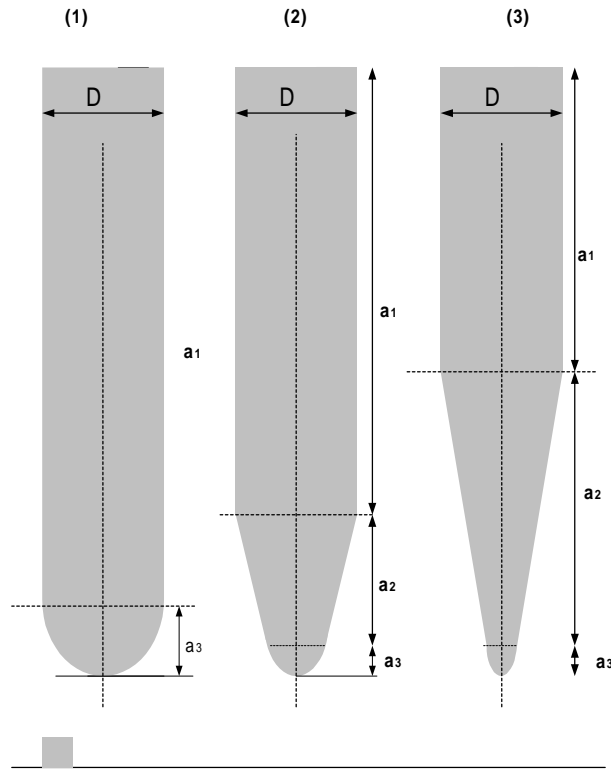


FIG. 3.5: Schéma des 3 formes des sondes. La longueur de la sonde est  $l_p = a_1 + a_2 + a_3$ .

Nous allons d'abord faire varier la longueur des trois sondes  $l_p$  en faisant varier  $a_1$  pour les apex définis ci-dessus (Fig. 3.5). Nous considérons uniquement ces trois sondes balayant à  $110nm$  au-dessus du dioptre sans objet, et nous calculons le flux transmis à travers ces sondes. Nous présentons sur la Fig. 3.6, le signal collecté en fonction de la longueur de la sonde. Comme nous pouvons le voir sur la figure, le signal varie de la même manière que dans le cas d'une sonde rectangulaire (voir Fig. 3.3). Bien que les apex soient différents, le mode fondamental est installé à partir de quelques microns au-dessus de la région de la partie conique comme dans le cas de la sonde rectangulaire. La période des oscillations observées est la même dans les trois cas bien que les apex soient différents. Cependant, l'amplitude des oscillations dépend fortement de la forme des apex et elle est d'autant plus grande que la valeur de  $a_3$  est grande, ce qui est conforme au fait que le flux transmis est proportionnel au rayon  $a_3$  [Tanaka *et al.* 98b]. D'autre part, pour les trois types de sonde, le signal diffère pour les faibles valeurs de  $a_1$  tant que le mode fondamental n'est pas installé et ceci montre l'influence de la forme de la sonde dans le couplage du champ au dessus du dioptre avec le mode susceptible de se propager dans la sonde.

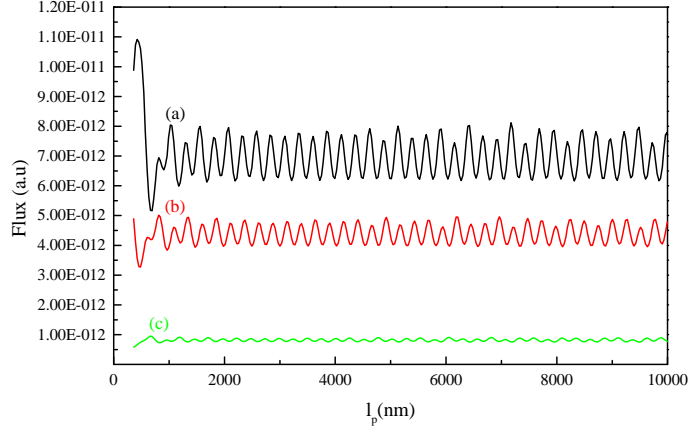


FIG. 3.6: La variation du signal transmis en fonction de la longueur des trois sondes. (a) forme 1, (b) forme 2 et (c) forme 3.

Comme étape suivante, pour les trois formes précédentes, nous étudions le signal transmis quand les sondes balayent à hauteur constante le même objet de taille sub-longueur d'onde. Les courbes de la Fig. 3.6 sont très importantes car elles nous permettent à la fois de ne considérer que les valeurs de la longueur de la sonde pour lesquelles le mode est installé et de n'utiliser que des valeurs pour lesquelles le signal transmis correspond à un minimum, pour diminuer l'effet des interférences et pouvoir ainsi comparer les trois flux. A partir de ces courbes nous avons considéré les valeurs de  $a_1$  suivantes :  $a_1 = 9520nm$  pour la courbe (a),  $a_1 = 9272nm$  pour la courbe (b) et  $a_1 = 9185nm$  pour la courbe (c). Nous présentons sur la Fig. 3.7, le flux transmis à travers ces trois sondes balayant l'objet de  $100 \times 100(nm^2)$ .

Nous observons sur la Fig. 3.7, d'une part que lorsque le rayon de l'apex  $a_3$  décroît, la longueur de la partie conique augmente et le signal diminue. D'autre part, le signal détecté par les trois sondes est très différent de la distribution du champ électrique calculée pour un objet seul sans la présence de la sonde au chapitre 2 (Fig. 2.4, § 2.3.2).

En effet, pour les sondes de forme (1) et (2), au voisinage de l'objet, la courbe du flux transmis montre deux pics de part et d'autre d'un minimum qui est proche du zéro, contrairement au cas de la sonde de la forme (3), où on ne voit pas de minimum net au voisinage de l'objet. Nous constatons aussi que la valeur moyenne du flux transmis décroît quand le rayon de l'apex décroît ce qui est en bon accord avec les résultats de Tanaka [Tanaka *et al.* 98b]. Le signal transmis à travers la sonde dépend donc fortement de la forme de la sonde et de sa position par rapport à l'échantillon. Ce qui reste comparable à la distribution du champ électrique, est que le flux transmis augmente toujours quand la sonde passe au-dessus de l'objet.

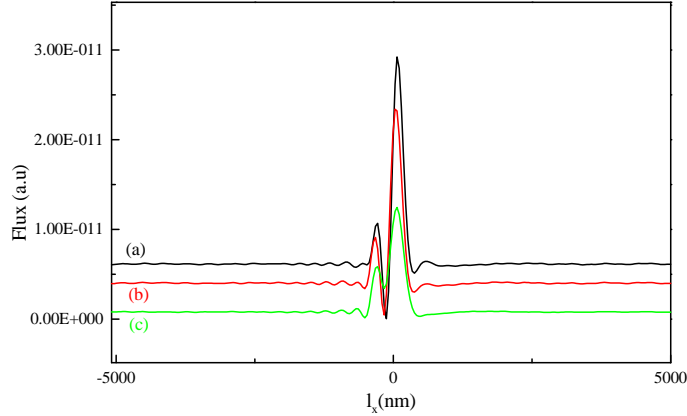


FIG. 3.7: Signal collecté par les trois types de sonde quand elles balayent à hauteur constante un objet sub-longueur d'onde  $100 \times 100(nm^2)$ .

Nous pouvons aussi voir que des oscillations de petite période sont toujours présentes à gauche de l'objet. Ces oscillations sont plus localisées et plus faibles en amplitude que les oscillations observées dans le cas de l'objet sans sonde (Fig. 2.4, § 2.3.1). Cependant les oscillations de grande période à droite de l'objet sur la Fig. 2.4, sont invisibles dans le cas où la sonde est prise en compte. Ce comportement montre la perturbation induite par la sonde par rapport à la distribution du champ de l'objet seul. Les interactions multiples et complexes entre les champs dûs à la présence du substrat, de l'objet et de la sonde peuvent expliquer ces observations dans la mesure où un système simple d'interférences ne peut plus s'établir [Goumri-Said *et al.* 04b, Goumri-Said 03] (voir Annex B).

Bien que la résolution des systèmes précédents ne puisse être facilement évaluée, le fait que la sonde ayant le plus grand rayon d'apex conduise à des images optiques de contraste plus grand, nous sommes en mesure de conclure que les sondes d'apex faibles posséderont une meilleure résolution que les sondes d'apex plus élevé.

### 3.4 Effet de la distance sonde-objet

Afin de compléter l'étude des paramètres importants dans un PSTM, nous allons étudier l'effet de la distance sonde-objet sur le flux transmis. Nous considérons les distances suivantes:  $g = 10, 50, 100$  et  $150nm$  où  $g$  représente la distance apex-face supérieure de l'objet (sur la Fig. 3.2). Nous considérons uniquement le cas de la sonde de forme (2) et pour le même objet. Les résultats sont reportés sur la Fig. 3.8.

Le flux transmis a toujours la même allure de variation pour toutes les valeurs de  $g$ , mais à partir de la distance  $g = 150nm$ , nous remarquons que l'allure de la courbe du flux, est modifiée par rapport aux autres courbes. En effet, à cette distance la différence entre le grand et le petit pic commence à disparaître. Pour cette distance, la différence entre les



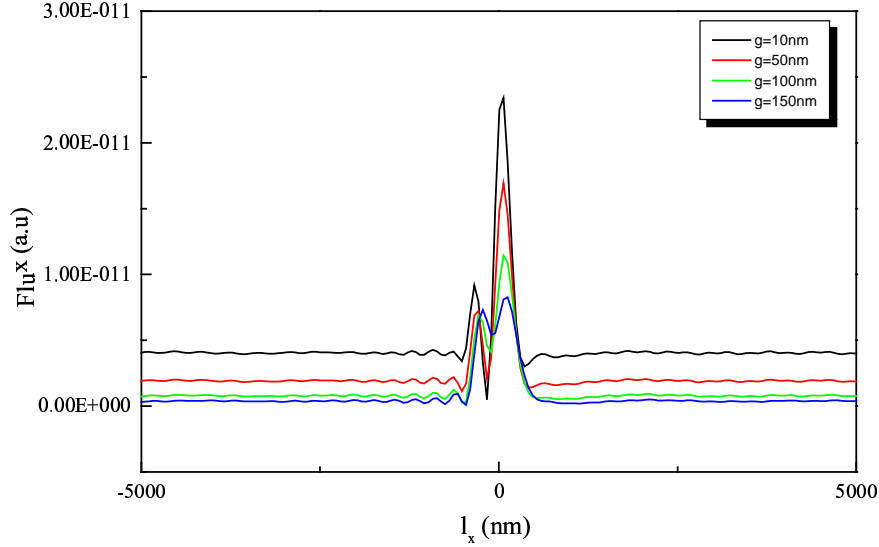


FIG. 3.8: Variation du signal transmis en fonction de la position de la sonde par rapport à l'objet pour différentes valeurs de  $g$ , la sonde retenue correspond à la forme (2).

deux pics de la courbe du flux, décroît de 50% par rapport à la différence entre les deux pics pour la distance  $g = 10nm$ . Par conséquent, la courbe du flux a tendance à présenter un seul pic quand la sonde passe au-dessus de l'objet à grande distance. Ceci s'explique par le fait que la détection des ondes évanescentes diffusées par l'objet devient de plus en plus faible quand on s'éloigne de l'objet alors que l'importance des ondes progressives croît.

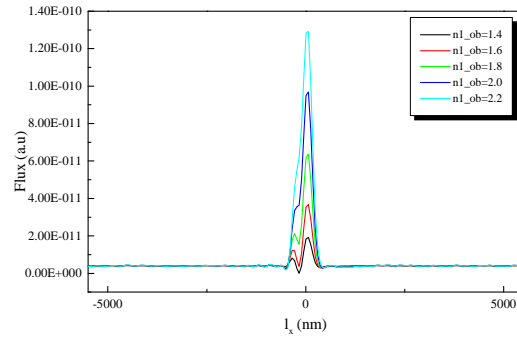
Nous remarquons aussi que la valeur moyenne du flux transmis décroît fortement en fonction de la distance sonde-objet. Quand on passe de la distance  $g = 10nm$  à  $g = 50nm$ , le flux transmis diminue de 45%. Il diminue aussi de 66% et 70.4% quand on passe à distance  $g = 100nm$  et  $g = 150nm$  respectivement.

Nous pouvons conclure de cette étude que la distance sonde-objet est un paramètre très important dans l'interprétation des images optiques. Lorsque la sonde s'éloigne de l'objet, la forme de la distribution des flux est plus lisse car les basses fréquences spatiales sont moins présentes, ceci confirme l'analyse de Carminati [Carminati et Greffet 95b].

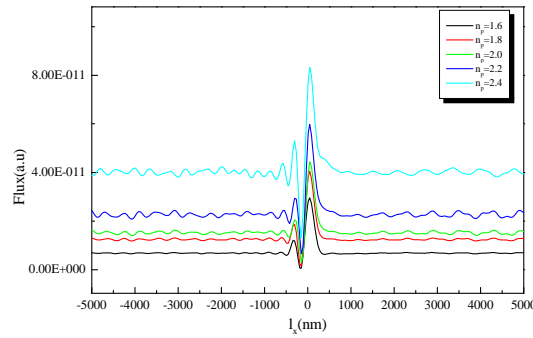
### 3.5 Effet des indices de réfraction de l'objet et de la sonde

Pour déterminer les mécanismes fondamentaux dans la formation du contraste des images de champ proche optique, nous avons fait varier, en premier, l'indice de l'objet

dans l'intervalle de  $n_{1ob} = \{1.4, 1.6, 1.8, 2.2\}$ , ce qui conduit à une variation d'indice locale de  $\Delta n = \{-0.058, 0.142, 0.342, 0.542, 0.742\}$  avec  $\Delta n = n_{prisme} - n_{1ob}$ . Les autres indices (sonde et prisme) sont conservés.



(a)



(b)

FIG. 3.9: Variation du signal pour différentes valeurs de : (a) l'indice de réfraction de l'objet  $n_{1ob}$ , (b) indice de réfraction de la sonde  $n_p$ .

Comme nous pouvons l'observer sur la Fig. 3.9(a), lorsque la sonde est latéralement loin de l'objet, le flux transmis par la sonde a la même valeur moyenne pour toutes les valeurs d'indices étudiés. Mais lorsque la sonde passe au-dessus de l'objet, le flux transmis croît avec l'indice de l'objet. Ceci est dû au fait que les objets d'indice de réfraction plus élevé diffusent plus de champ.

A partir de ces courbes, nous remarquons que le pic principal du flux transmis, qui montre le passage la sonde au-dessus de l'objet, augmente de 51% quand l'indice passe de 1.4 à 1.6, de 58% quand l'indice de réfraction passe de 1.6 à 1.8 et il augmente encore

de 64% entre 1.8 et 2.0. Cette variation est passée à 75% entre 2.0 et 2.2. Ceci veut dire, que lorsque la variation d'indice augmente, le pic devient de plus en plus haut, et donc le contraste de l'image sera amélioré.

Sur la Fig. 3.9(b), nous présentons les courbes du flux transmis par les sondes, quand les indices de réfraction de celles-ci varient dans l'intervalle  $n_p = \{1.6, 1.8, 2.0, 2.2, 2.4\}$ . Nous constatons d'une part que la valeur du signal transmis dans la sonde, augmente quand l'indice de réfraction augmente, d'autre part les oscillations qui se trouvent de part et d'autre du pic principal, ont une amplitude de plus en plus grande, quand l'indice de la sonde augmente. Ceci est dû au fait que dans le champ évanescent du dioptre, la sonde de fort indice crée une perturbation plus forte, car elle se déplace toujours à  $110nm$  du substrat.

Nous remarquons que les deux ensembles de courbes (a) et (b) de la Fig. 3.9 conduisent à la même conclusion, plus les indices de réfractions de l'objet et/ou de la sonde sont supérieurs à celui du substrat, plus la diffusion est grande et donc l'amplitude du pic principal est augmentée et le contraste de l'image est amélioré. Ce résultat confirme que la diffusion dans le système sonde-substrat-objet dépend de tous ses paramètres opto-géométriques.

### 3.6 Effet de l'angle d'incidence

Comme nous l'avons vu dans la définition de la profondeur de pénétration (§3.1), l'amplitude du champ diffusé par l'objet dépend de l'angle d'incidence  $\theta$ . Cette grandeur influence aussi le flux détecté par la sonde. Pour étudier l'effet de ce paramètre, nous choisissons pour l'angle d'incidence les valeurs suivantes:  $10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 45^\circ$  et  $80^\circ$ . Les résultats sont reportés sur la Fig. 3.10.

Nous constatons que le signal transmis varie avec l'angle d'incidence. L'analyse des courbes de la Fig. 3.10(a), montre que le flux transmis diminue quand  $\theta$  augmente. Ceci peut être expliqué par le fait que  $d_p$  devient de plus en plus faible quand l'angle d'incidence tend vers  $\pi/2$ . C'est ce que nous constatons lorsque  $\theta = 80^\circ$  (Fig. 3.10(c)), où la valeur moyenne du flux transmis est presque nulle. Mais quand on observe la dynamique du signal (le rapport entre l'intensité du pic principal et le niveau de base du signal transmis) quand la sonde passe au-dessus de l'objet, nous remarquons que pour  $\theta = 10^\circ$  (Fig. 3.10(b), inférieur à l'angle critique), cette dynamique est de l'ordre de 0.14, alors que pour  $\theta = 80^\circ$ , on trouve 8.76. Ce résultat montre l'intérêt de se mettre en réflexion totale: bien que le niveau de base diminue quand l'angle d'incidence augmente, la présence de l'objet est mieux détectée dans ce cas.

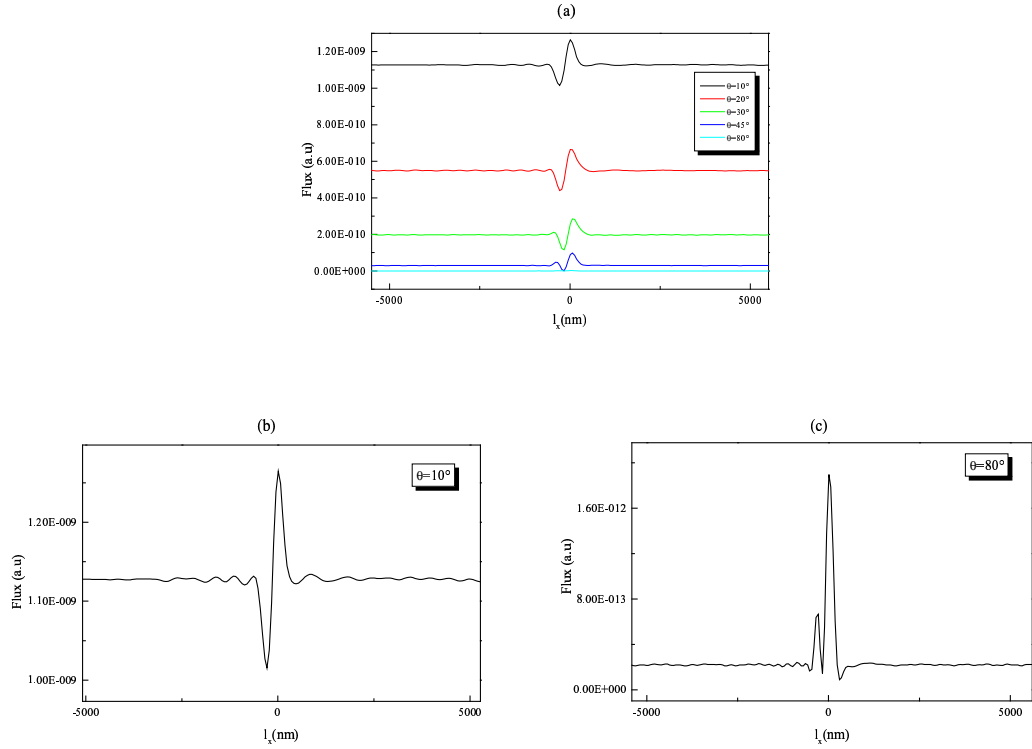


FIG. 3.10: Variation du signal transmis pour différentes valeur d'angle d'incidence  $\theta$ . En (b) et (c) nous présentons un agrandissement de l'évolution des flux pour  $\theta = 10^\circ$  et  $\theta = 80^\circ$

## 3.7 Etude des fonctions de transfert dans un PSTM

En optique les méthodes de l'analyse fréquentielle et de la théorie des systèmes linéaires jouent un rôle important dans l'analyse de la formation des images. Le concept de fonction de transfert est très utilisé en imagerie optique classique [Goodman 68]. Nous allons consacrer la dernière section de ce chapitre à l'étude de la fonction de transfert dans la configuration du PSTM à partir de notre modèle global.

### 3.7.1 Calcul de la fonction de transfert

Avant de présenter les résultats acquis, nous allons tout d'abord détailler le calcul de la fonction de transfert dans un système PSTM à partir de la Fig. 3.11.

Dans la situation standard de notre étude l'objet est éclairé par une onde plane incidente. Il en résulte une distribution de l'intensité du champ électrique  $I(x)$  dans le plan

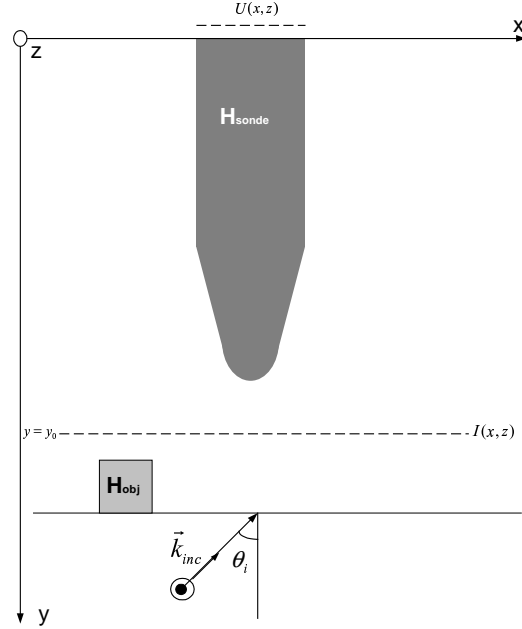


FIG. 3.11: Les hypothèses de calculs de la fonction de transfert du PSTM.  $H_{sonde}$  est la fonction spectrale de la sonde,  $H_{obj}$  présente la réponse de l'objet à une onde plane incidente.

$y = y_0$ , en l'absence de la sonde. L'apex de la sonde vient maintenant balayer ligne par ligne le plan  $y = y_0$ , le signal collecté au long d'une ligne par la sonde via le mode propre qui s'établit est alors  $U(x)$ . La fonction de transfert  $H(x)$  si elle existe vérifie l'équation associée au produit de convolution ci-dessous:

$$U(x) = H(x) \otimes I(x) \quad (3.3)$$

La transformée de Fourier de l'expression précédente donne:

$$\tilde{U}(k) = \tilde{H}(k) \times \tilde{I}(k) \quad (3.4)$$

Où  $k = k_x$  est le vecteur d'onde. La fonction de transfert  $\tilde{H}(k)$  est définie alors comme le rapport de la transformée de Fourier du signal détecté  $\tilde{U}(k)$  et de la transformée de Fourier de l'intensité du champ  $\tilde{I}(k)$  en l'absence de la sonde.

Dans un système optique classique la fonction de transfert est unique et ne dépend pas de l'objet mesuré. Dans le cas de la microscopie de champ proche, la sonde est positionnée dans le champ proche de l'objet étudié, et une interaction peut se produire entre la sonde et l'objet. Une question se pose: dans quel cas la sonde peut elle être considérée comme

passive ? Dans ce cas, elle ne se couple pas au champ diffusé par l'objet et on peut alors déterminer la fonction de transfert du système.

### 3.7.2 Concept de sonde passive

Des travaux théoriques [Carminati et Greffet 95b, Barchiesi 98] et expérimentaux ont montré que l'on peut admettre que la détection est passive dans certaines conditions [M.Totzeck et Krumbugel 94, M.Totzeck et Krumbugel 95]. L'hypothèse de la sonde passive, implique que le champ détecté en présence de la sonde est proportionnel au champ qui existe en son absence. D'autres arguments qualitatifs ont justifié que la sonde soit considérée comme passive dans la détection en champ proche notamment en PSTM/STOM. En effet les travaux expérimentaux sur le PSTM/STOM, réalisés par de Fornel et al [de Fornel *et al.* 96] sur une marche en quartz comparés avec des simulations sans sonde ont suggéré la passivité de la détection de la sonde. Dans cette section, nous cherchons à savoir dans quelles conditions la détection est passive, ce qui signifie que la sonde est éclairée par le champ proche qui existerait en son absence.

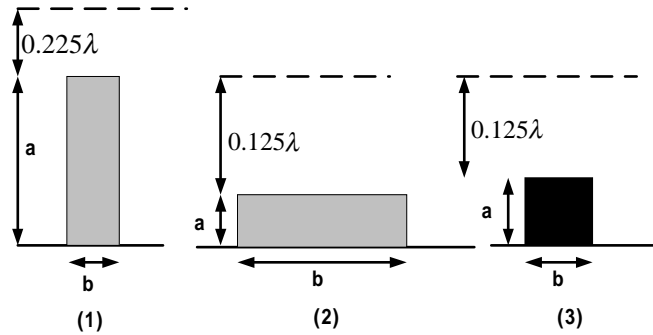


FIG. 3.12: Echantillons considérés dans les calculs: (1)  $a = \lambda/5$ ,  $b = \lambda/20$  et  $n = 1.458$  (2)  $a = \lambda/20$ ,  $b = \lambda/5$  et  $n = 1.458$ , (3)  $a = \lambda/20$ ,  $b = \lambda/20$  et  $n = 2.25$ .

Afin de poursuivre la réflexion à propos de la passivité de la détection en champ proche nous avons repris le système PSTM précédemment étudié par Carminati [Carminati 96]. Nous considérons les 3 objets représentés sur la Fig. 3.12, la sonde est monomode de diamètre  $D = 284nm$  avec partie conique d'angle  $\varphi = 15^\circ$  et d'apex triangulaire. Pour être conformes aux conditions considérées, nous éclairons le système en réflexion totale interne sous un angle  $\theta = 45^\circ$ . Nos résultats sont présentés sur la Fig. 3.13(a), en comparaison avec les calculs réalisés par Carminati [Carminati et Greffet 95b] par la méthode perturbative.

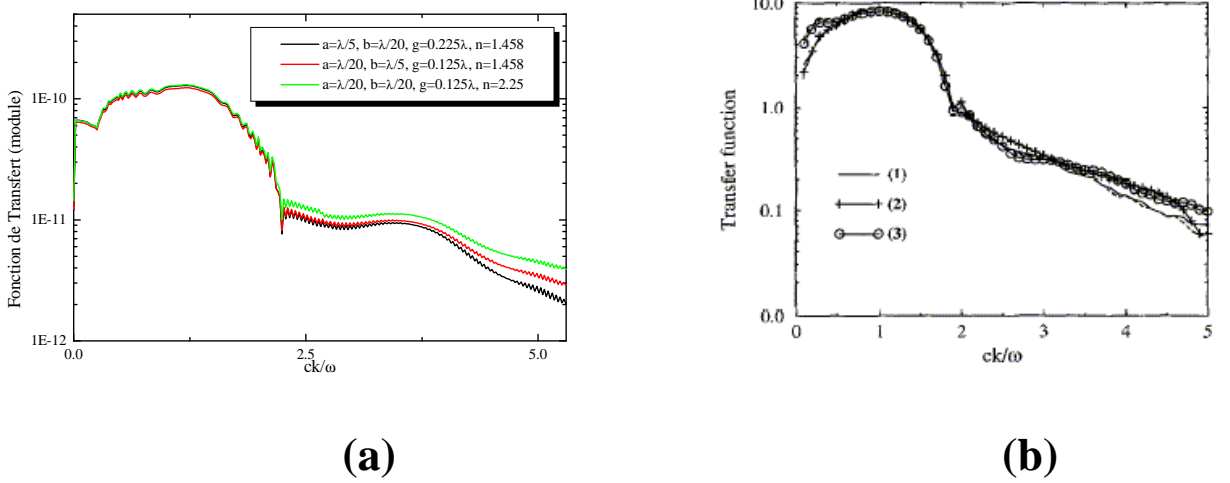


FIG. 3.13: Calcul des fonction de transfert pour les objets de la Fig. 3.12: (a) Nos résultats. (b) Résultats obtenus par Carminati [Carminati et Greffet 95b, Greffet 89].

Dans chaque cas, nous avons calculé le module de la fonction de transfert en utilisant la relation (3.4). Nous présentons sur la Fig. 3.13, et en échelle semi-logarithmique, les fonctions de transfert en fonction des fréquences spatiales  $k$  normalisées par  $2\pi/\lambda$ .

En observant nos résultats et en les comparant à ceux de Carminati (Fig. 3.13b), nous notons l'accord entre les résultats obtenus par les deux méthodes. Nous distinguons deux régions dans le comportement de la fonction de transfert. Dans la région correspondant aux ondes radiatives ( $k < \omega/c$ ),  $\left| \tilde{H}(k) \right|$  augmente en fonction de  $k$ , tandis que dans la région correspondant aux ondes non-radiatives ( $k > \omega/c$ ),  $\left| \tilde{H}(k) \right|$  diminue quand  $k$  augmente. Cette diminution présente deux formes différentes : pour  $\omega/c < k < 2\omega/c$  où la pente n'est pas constante et augmente fortement quand on s'approche de  $2\omega/c$ . Vers cette valeur, Carminati avait noté une décroissance exponentielle (voir Fig. 3.13b), l'allure de nos courbes s'éloigne légèrement de cette forme. La chute de la valeur de la fonction de transfert peut être associée au fait que le couplage entre le champ proche et le mode guidé de la sonde est moins efficace pour les hautes fréquences spatiales.

Ces résultats montrent que pour certaines conditions particulières (d'éclairage, de taille d'objet, distance sonde-objet etc...) la sonde est passive et le flux transmis couplé au mode guidé de la fibre est proportionnel au produit de convolution entre la fonction de transfert ainsi déterminée et le module du carré de l'intensité du champ électrique calculé en l'absence de la sonde. La détection de la sonde est indépendante de la nature de ces objets et de leur distance par rapport à la sonde [Carminati et Greffet 95b]. Cependant, si pour ces objets étudiés, il a été possible de déterminer une fonction de transfert, ceci n'est

pas forcément vrais dans toutes les configurations [Kann *et al.* 95b]; nous allons faire la même analyse pour les sondes étudiées précédemment (voir paragraphe 3.4) et voir s'il est possible de déterminer une fonction de transfert unique de notre système.

### 3.7.3 Etude des Fonctions de transfert d'une sonde monomode

Nous considérons maintenant la sonde monomode de forme 2 de diamètre  $D = 200nm$ , ayant un apex de taille  $a_3 = 50nm$  et  $\varphi = 10^\circ$ . L'angle d'incidence est  $\theta = 60^\circ$  et  $\lambda = 632.8nm$

Dans un premier temps nous allons considérer deux objets sub-longueur d'onde de tailles  $100 \times 100(nm^2)$  et  $10 \times 10(nm^2)$  respectivement. Nous calculons les fonctions de transfert pour ces deux objets avec la même sonde, en faisant varier la distance sonde-objet dans le domaine :  $g = 10, 50, 150, 200, 250$  et  $300(nm)$ . Les résultats sont présentés sur les Fig. 3.14(a) et Fig. 3.14(b) respectivement.

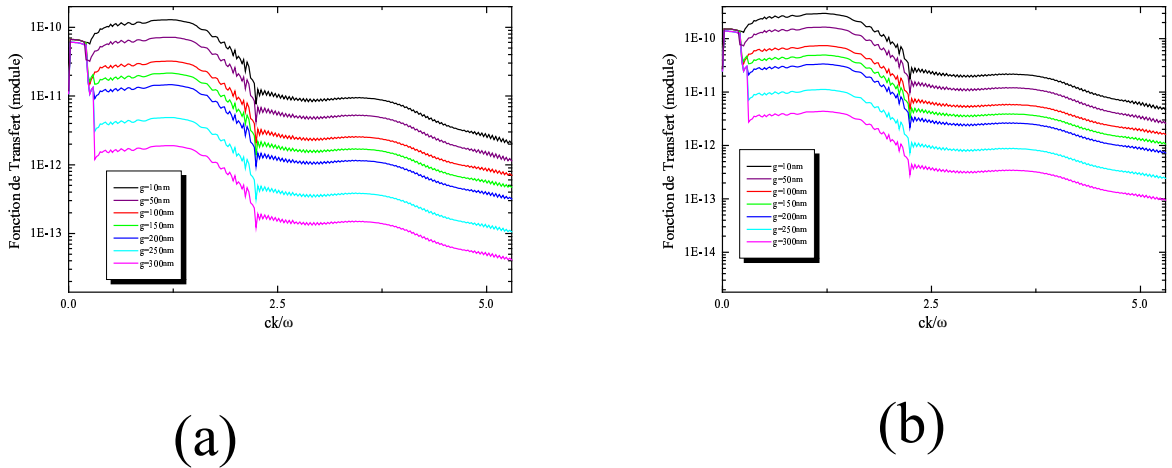


FIG. 3.14: Fonction de transfert calculée pour différentes valeurs de distance sonde-objet  $g$  et pour une sonde de forme 2 (a) objet de taille  $100 \times 100(nm^2)$ , (b) objet de taille  $10 \times 10(nm^2)$ .

Quand on observe l'évolution des courbes de la Fig. 3.14, quand la distance sonde-objet augmente, nous remarquons que  $|\tilde{H}(k)|$  diminue. Plus la sonde est proche de l'objet, plus elle interagit avec les ondes évanescentes, reliées à des détails fins ou des hautes fréquences spatiales. D'autre part, la fréquence de coupure entre les deux zones : hautes fréquences et basses fréquences, est toujours la même  $2\omega/c$ . Ces observations sont valables pour les deux objets. Ces résultats sont en très bon accord avec les résultats de la section 3.4,



plus la sonde s'éloigne de l'objet (donc du substrat) moins elle devient sensible au champ proche de l'objet et donc aux ondes évanescentes.

D'autre part, quand on observe attentivement l'évolution des fonctions de transfert en fonction de la distance sonde-objet, on constate que pour les cas étudiés cette évolution suit approximativement une équation du type :

$$\tilde{H}(k, g_1) = \tilde{H}(k, g_0) \cdot C(g_0, g_1) \cdot D(\Delta n \cdot e) \quad (3.5)$$

Où

$C(g_0, g_1) = \exp\left(2\frac{g_1 - g_0}{d_p}\right)$ , est une fonction qui dépend de la profondeur de pénétration  $d_p$  et des deux distances sonde-objet consécutives  $g_0$  et  $g_1$ .

$D(\Delta n \cdot e)$  est un facteur qui dépend de la forme de l'objet et son indice de réfraction. En effet, en comparant l'évolution de la fonction de transfert quand la distance sonde-objet varie et pour les deux objets, nous avons remarqué que pour un point donné (situé dans n'importe quelle zone: radiative ou évanescente) le logarithme de la fonction de transfert varie linéairement en fonction des distances. Cette fonction n'est pas la même pour les deux objets, ce qui suggère qu'elle dépend de la forme et de l'indice de réfraction de l'objet.

A partir de ces résultats, nous concluons que pour les deux objets et les distances sonde-objet considérées, le signal transmis dans la sonde est relié au module au carré de l'intensité du champ électrique par une "pseudo-fonction" de transfert qui dépend de la distance sonde-objet, de la taille et l'indice de l'objet.

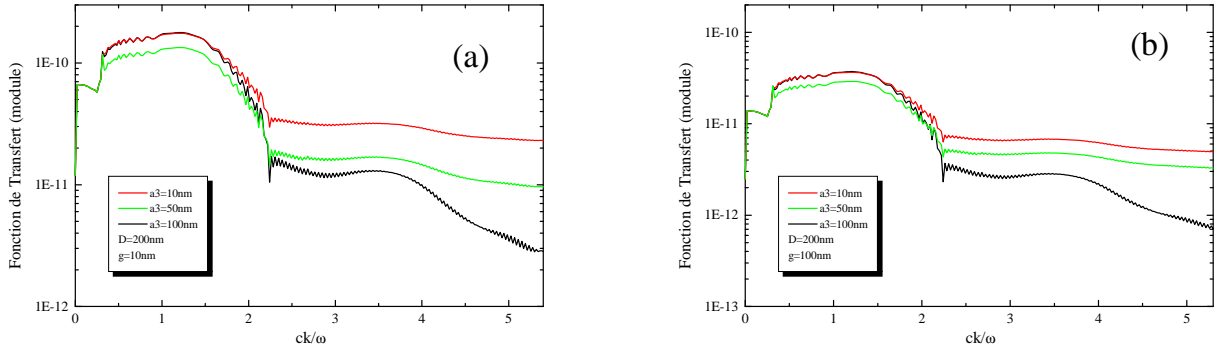


FIG. 3.15: Fonctions de transfert de la sonde calculée pour différentes formes d'apex et pour deux distances sonde-objet : (a)  $g = 10 \text{ nm}$  et (b)  $g = 100 \text{ nm}$ .

Maintenant nous étudions l'effet de la forme de la sonde en considérant les trois formes déjà étudiées (section 3.2) et ce pour deux distances sonde-objet :  $g = 10$  et  $100 \text{ nm}$ . Les courbes des fonctions de transfert sont présentées sur la Fig.3.15. Nous remarquons que dans les deux cas, plus l'apex est petit, mieux la sonde détecte les hautes fréquences spatiales. Mais dans ces conditions, la sonde peut aussi générer des fréquences spatiales,

ce qui induit que la résolution dépend évidemment des caractéristiques de la sonde. De ces courbes, nous retrouvons aussi le résultat déduit de la Fig.3.14, quand on compare les amplitudes des fonctions de transfert pour chaque type d'apex et pour les deux distances sonde-objet: plus la sonde est proche de l'objet, plus elle interagit avec les ondes évanescentes, reliées aux détails fins de la structure de l'objet.

### 3.8 Conclusion

L'objectif principal de ce chapitre, qui consiste en une première application de notre modèle global, est l'étude des différents paramètres qui interviennent dans la détection du champ proche par une sonde monomode. Cette étude s'est révélée fructueuse pour différentes raisons. D'une part nous avons montré que la combinaison méthode différentielle S matrice permet de contrôler effectivement les paramètres définissant le système sonde-objet dans une expérience PSTM. D'autre part ces premières simulations avec une sonde monomode nous ont permis de valider le modèle global utilisé puisque nos nouveaux résultats sont en bon accord avec les études précédentes sur des systèmes bien connus.

Ce modèle, nous a permis d'étendre notre analyse à une grandeur très importante, qui est la fonction de transfert, encore peu étudiée voire mal définie, notamment théoriquement. Les résultats obtenus montrent qu'il est difficile de parler aujourd'hui de façon sûre de l'existence d'une fonction de transfert et de la passivité des sondes monomodes. Il faudra donc poursuivre cette analyse en particulier pour affiner l'évolution observée en fonction de la distance sonde-objet ou de la forme des apex. Tant que ce travail n'a pas été accompli il semble plus raisonnable de parler de pseudo-fonction de transfert et de sonde passive dans des conditions expérimentales particulières. Si nos résultats confirment ceux de Carminati dans les configurations qu'il a choisies, lorsque ces configurations sont modifiées il n'apparaît plus possible de déterminer une fonction de transfert unique.

Nous allons montrer dans les chapitres suivants que notre démarche ne nous limite pas aux sondes monomodes mais qu'elle s'applique avec la même efficacité à des cas complexes: sondes multimodes, métallisées ou non et de dimensions tout à fait comparables aux sondes utilisées lors des expériences.



## Chapitre 4

# Etude de la formation des images optiques obtenues avec des sondes multimodes

Les expériences réalisées avec un PSTM utilisent souvent des sondes fabriquées à partir des fibres multimodes. La méthode que nous l'utilisons permet le calcul du signal collecté en fonction des paramètres de la sonde quelque soit sa nature modale (monomode ou multimode). Dans le présent chapitre nous exposons les différents aspects liés à la modélisation de la détection par une sonde multimode en champ proche. Après un bref rappel sur la propagation dans les guides planaires multimodes, nous présentons les calculs du signal collecté par différentes sondes. Ces résultats nous permettent d'étudier l'effet de différents paramètres: diamètre de la sonde, taille de l'apex, forme de la partie conique (taper) et taille de l'objet, sur le signal collecté par la sonde.

### 4.1 Analyse modale

#### 4.1.1 Rappel sur le calcul des modes dans un guide planaire

Un guide planaire multimode est un système classique de guide d'onde diélectrique. Ce système peut être schématisé à partir d'un modèle à trois couches (voir Fig.4.1), d'indices respectifs  $n_{1a}$ ,  $n_{1b}$  et  $n_{1a}$ . Un tel système permet de combiner les deux approches : modale et optique géométrique. Du point de vue optique géométrique, le guidage du signal dans la sonde (Fig.4.1) est un problème de propagation du rayon lumineux dans un système à trois couches, déjà traité dans la littérature [Adam 81].

Notre système est un guide symétrique, car les deux milieux extrêmes ont le même indice  $n_{1a}$ . Nous avons deux interfaces 1 – 2 et 1 – 3, où la propagation du rayonnement dépend de la valeur de l'angle  $\phi$ , qui n'est autre que le complémentaire à l'angle d'incidence à chaque interface. Cet angle est lié à l'angle d'incidence  $\theta$  par la relation :

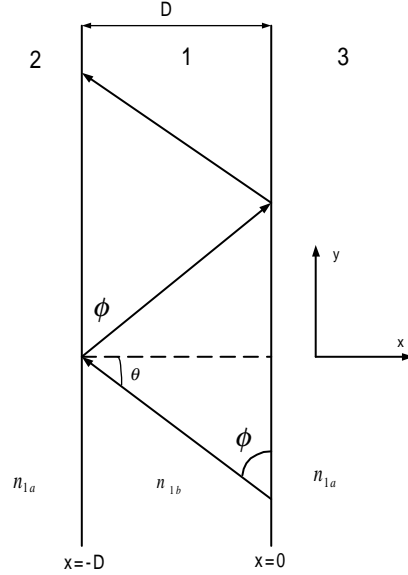


FIG. 4.1: Propagation d'un rayon lumineux dans un guide planaire à trois couches.

$\phi = \frac{\pi}{2} - \theta$  et vérifie aussi  $\cos\phi \geq \frac{n_{1a}}{n_{1b}}$ . Ces angles  $\phi$  doivent toujours vérifier la condition de réflexion totale aux deux interfaces, ce qui signifie que la lumière se trouve confinée dans la couche du milieu, qui représente le coeur de notre guide. Les conditions précédentes sont nécessaires à l'existence et à la propagation d'un mode guidé dans la fibre. Cette propagation est gouvernée par une exponentielle de la forme  $\exp(i\beta y)$  quand l'onde incidente se propage suivant la direction  $y$ , et  $\beta$  est la constante de propagation liée à l'angle  $\phi$  par :  $\beta = n_{1b}k \cos \phi$ . Pour qu'un mode puisse exister dans une fibre, son indice effectif doit vérifier la relation :

$$n_{1b} \geq n_i \geq n_{1a} \quad (4.1)$$

avec  $n_i = n_{1b} \sin \theta_i = n_{1b} \sin \phi_i$

La valeur minimum de  $\beta$  pour une propagation guidée, dite aussi condition de coupure du mode est égale à  $n_{1a}k$ . Cependant,  $\beta$  et  $\phi$  ne peuvent prendre que des valeurs discrètes [Ulrich et Prettl 73]. En tenant compte des réflexions qui apparaissent sur les interfaces de la zone guidante 1, la condition de résonance peut être exprimée sous la forme suivante :

$$2Dkn_{1b} \sin \phi - \delta_{12} - \delta_{13} = 2\pi N \quad (4.2)$$

Où  $\delta_{12}$ ,  $\delta_{13}$  sont les déphasages qui apparaissent aux interfaces 1-2 ( $x = -D$ ) et 1-3 ( $x = 0$ ), respectivement. Dans la polarisation TE, où le champ électrique est normal au plan d'incidence, ces déphasages sont donnés par :

$$\delta_{12} = \delta_{13} = 2 \tan^{-1} \left[ \left( \frac{\beta^2 - n_{1a}^2 k^2}{n_{1b}^2 k^2 - \beta^2} \right)^{1/2} \right]$$

On introduit les nouvelles variables :  $p$ ,  $q$  et  $r$  données par :

$$\begin{cases} p^2 = \beta^2 - n_{1a}^2 k^2 \\ q^2 = n_{1b}^2 k^2 - \beta^2 \\ r^2 = \beta^2 - n_{1a}^2 k^2 = p^2 \end{cases}$$

Puis en injectant ces valeurs dans l'équation (4.2) on aboutit à l'équation des valeurs propres [Adam 81] suivante :

$$\tan(Dq - N\pi) = \frac{q(p+q)}{q^2 - pr} \quad (4.3)$$

où  $N = 0, 1, 2, \dots$

Cette équation aux valeurs propres détermine le nombre de modes propres possibles dans le guide. Comme nous pouvons le constater, ce nombre dépend essentiellement des indices de réfraction ainsi que de la dimension du guide (i.e. diamètre de la fibre).

Dans le but d'avoir le nombre de modes propres possibles dans le guide, l'équation précédente peut être exprimée en fonction des indices de réfraction des trois couches comme suit :

$$\tan \left( Dk_c (n_{1b}^2 - n_{1a}^2)^{1/2} - N\pi \right) = \left( \frac{n_{1b}^2 - n_{1a}^2}{n_{1b}^2 - n_{1a}^2} \right)^{1/2}$$

où  $k_c$  est le vecteur d'onde qui correspond à la condition de coupure. Nous définissons aussi une fréquence normalisée  $\nu = \frac{Dk}{2} (n_{1b}^2 - n_{1a}^2)^{1/2}$ .

Le nombre de modes prend toujours des valeurs entières et il est donné par :

$$M = \frac{1}{\pi} \left[ 2\nu - \tan^{-1} \left( \frac{n_{1b}^2 - n_{1a}^2}{n_{1b}^2 - n_{1a}^2} \right)^{1/2} \right]_{entier} \quad (4.4)$$

### 4.1.2 Calcul du flux pour chaque mode propre de la sonde

Comme nous l'avons déjà considéré dans le chapitre 2, la valeur moyenne du flux dans le guide est donnée par l'intégrale sur la section du guide de la composante du vecteur de Poynting  $S_z$  soit :

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} S_z dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \Re e(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*)_z dx \quad (4.5)$$

En polarisation TE,  $S_z$  est donnée par :

$$S_z = \frac{1}{2} E_y H_x^* = \frac{\beta}{2\omega\mu_0} |E_y|^2 \quad (4.6)$$

Où

$$E_y = \begin{cases} A \exp(-rx), & x \geq 0 \\ A \cos qx + B \sin qx, & 0 \geq x \geq -D \\ (A \cos Dq - B \sin Dq) \exp p(x+D), & -D \geq x \end{cases} \quad (4.7)$$

et

$$H_x = -\frac{\beta}{\omega\mu_0} E_y \quad (4.8)$$

Du fait que notre sonde est un guide d'onde à trois milieux symétrique, l'intégrale de l'équation (4.5) doit être séparée en trois contributions :

$$\begin{cases} P_2 = P_3 = \left(\frac{\beta}{2\omega\mu_0}\right) \frac{A^2}{2p} \left(\frac{q^2+r^2}{p^2+q^2}\right) \\ P_1 = \left(\frac{\beta}{2\omega\mu_0}\right) \frac{A^2}{2} \left(\frac{q^2+r^2}{q^2}\right) \left[D + \frac{p}{q^2+p^2} + \frac{r}{q^2+r^2}\right] \end{cases}$$

Le flux total pour un mode guidé est donné par :

$$P = P_1 + 2P_2 = \left(\frac{\beta}{2\omega\mu_0}\right) \frac{A^2}{2} \left(\frac{q^2+r^2}{q^2}\right) \left[D + \frac{1}{p} + \frac{1}{r}\right] \quad (4.9)$$

Le dernier terme dans l'équation (4.9) est appelé largeur effective du guide. Cette quantité correspond à la distance entre les points de la zone 2 et 3 où l'intensité du champ décroît de  $1/e$  par rapport à sa valeur aux interfaces. Les coefficients  $A$  et  $B$  de l'équation (4.7) sont liés par la relation suivante :

$$A^2 = \left(\frac{qB}{r}\right)^2 = \frac{P}{\left(\frac{\beta}{2\omega\mu_0}\right) \left(\frac{q^2+r^2}{q^2}\right) \left[D + \frac{1}{p} + \frac{1}{r}\right]} \quad (4.10)$$

Le calcul du flux dans une sonde multimode est la somme des flux transmis dans chaque mode.

Après ces considérations, nous nous intéressons à l'établissement de chacun des modes propres dans le but de voir la contribution de chaque mode au signal transmis par la sonde. Comme première étape, nous considérons la sonde sans objet, ce qui nous permet d'étudier l'installation des modes guidés à travers la sonde à partir du champ évanescents du substrat frustré par la sonde. Nous distinguons dans cette étude deux types de sondes à partir de la forme de leur apex : une sonde à faible apex  $a_3 = 10nm$  et angle du cône  $\varphi = 10^\circ$  et une sonde de plus grand apex  $a_3 = 50nm$  avec le même angle  $\varphi$ .

Le flux transmis à travers ces sondes est calculé en fonction de la variation de la longueur de la partie guidante en l'absence de l'objet. Nous avons calculé le flux du vecteur de Poynting à travers ces deux sondes, pour les différents modes guidés et différents diamètres

de  $D = 400nm$  à  $2000nm$ . Nous donnons dans les tableaux suivants, les valeurs des indices effectifs de chaque mode, le flux couplé à chaque mode ainsi que sa contribution (en pourcentage) au flux total transmis dans la sonde.

TAB. 4.1: Répartition du flux transmis à travers la sonde par les différents modes propres possibles (Pour une sonde d'apex  $50nm$ , d'angle  $\phi = 10^\circ$  et le diamètre  $D$  varie).

$D(nm)$	$n_i$	$\phi_{tot}$	$\phi_i$
400	$n_1 = 1.078$ $n_0 = 1.358$	$0.45 \cdot 10^{-11}$	$\phi_1 = 0.00025 \cdot 10^{-11}(0\%)$ $\phi_0 = 0.45 \cdot 10^{-11}(100\%)$
600	$n_2 = 1.0020$ $n_1 = 1.2329$ $n_0 = 1.4025$	$0.449 \cdot 10^{-11}$	$\phi_2 = 0.0(0\%)$ $\phi_1 = 0.00(0\%)$ $\phi_0 = 0.449 \cdot 10^{-11}(100\%)$
800	$n_2 = 1.12986$ $n_1 = 1.31450$ $n_0 = 1.42275$	$0.45 \cdot 10^{-11}$	$\phi_2 = 0.0(0\%)$ $\phi_1 = 0.018 \cdot 10^{-11}(4\%)$ $\phi_0 = 0.432 \cdot 10^{-11}(96\%)$
1200	$n_4 = 1.00065$ $n_3 = 1.15631$ $n_2 = 1.29227$ $n_1 = 1.38576$ $n_0 = 1.44020$	$0.45 \cdot 10^{-11}$	$\phi_4 = 0.0(0\%)$ $\phi_3 = 0.00225 \cdot 10^{-11}(0.5\%)$ $\phi_2 = 0.00315 \cdot 10^{-11}(7\%)$ $\phi_1 = 0.000225 \cdot 10^{-11}(0.5\%)$ $\phi_0 = 0.414 \cdot 10^{-11}(92\%)$
2000	$n_6 = 1.00731$ $n_5 = 1.18110$ $n_4 = 1.26987$ $n_3 = 1.33985$ $n_2 = 1.39240$ $n_1 = 1.42910$ $n_0 = 1.45087$	$0.45 \cdot 10^{-11}$	$\phi_6 = 0.0(0\%)$ $\phi_5 = 0.0(0\%)$ $\phi_4 = 0.0(0\%)$ $\phi_3 = 0.0(0\%)$ $\phi_2 = 0.045 \cdot 10^{-11}(10\%)$ $\phi_1 = 0.00(0\%)$ $\phi_0 = 0.405 \cdot 10^{-11}(90\%)$

D'après les résultats rapportés dans les deux tableaux, nous remarquons que le flux total collecté par les deux sondes en l'absence d'objet possède la même valeur moyenne, quel que soit le diamètre de la sonde, respectivement  $0.45 \cdot 10^{-11}$  et  $0.095 \cdot 10^{-11}$  pour les apex  $a_3 = 50nm$  et  $a_3 = 10nm$ . Dans les deux cas, le mode fondamental est très majoritairement excité et transporte entre 90% et 100% du signal pour les différents diamètres considérés. Nous constatons aussi que le flux transmis décroît quand le rayon d'apex diminue, comme dans le cas des fibres monomodes.

Nous pouvons prédire que loin de l'objet (latéralement), la sonde doit détecter la même intensité du champ électromagnétique, quelque-soit son diamètre. Mais quand elle passe au-dessus de l'objet, elle interagit avec le champ diffusé par l'objet, d'une manière différente selon sa forme et ses dimensions.



Il nous reste maintenant à étudier ce qui se passe lorsque l'on introduit un objet diffractant de taille sub-longueur entre le substrat et la sonde.

TAB. 4.2: Répartition du flux transmis à travers la sonde par les différents modes propres possible (Pour une sonde d'apex  $10nm$ , d'angle  $\phi = 10^\circ$  et le diamètre  $D$  varie).

$D(nm)$	$n_i$	$\phi_{tot}$	$\phi_i$
400	$n_1 = 1.078$ $n_0 = 1.358$	$0.095 \cdot 10^{-11}$	$\phi_1 = 0(0\%)$ $\phi_0 = 0.095 \cdot 10^{-11}(100\%)$
600	$n_2 = 1.0020$ $n_1 = 1.2329$ $n_0 = 1.4025$	$0.093 \cdot 10^{-11}$	$\phi_2 = 0.0(0\%)$ $\phi_1 = 0.00015(0\%)$ $\phi_0 = 0.093 \cdot 10^{-11}(100\%)$
800	$n_2 = 1.12986$ $n_1 = 1.31450$ $n_0 = 1.42275$	$0.095 \cdot 10^{-11}$	$\phi_2 = 0.0(0\%)$ $\phi_1 = 0.0(0\%)$ $\phi_0 = 0.095 \cdot 10^{-11}(100\%)$
1200	$n_4 = 1.00065$ $n_3 = 1.15631$ $n_2 = 1.29227$ $n_1 = 1.38576$ $n_0 = 1.44020$	$0.093 \cdot 10^{-11}$	$\phi_4 = 0.0(0\%)$ $\phi_3 = 0.0(0\%)$ $\phi_2 = 0.0(0\%)$ $\phi_1 = 0.0(0\%)$ $\phi_0 = 0.093 \cdot 10^{-11}(100\%)$
2000	$n_6 = 1.00731$ $n_5 = 1.18110$ $n_4 = 1.26987$ $n_3 = 1.33985$ $n_2 = 1.39240$ $n_1 = 1.42910$ $n_0 = 1.45087$	$0.1 \cdot 10^{-11}$	$\phi_6 = 0.0(0\%)$ $\phi_5 = 0.0(0\%)$ $\phi_4 = 0.0(0\%)$ $\phi_3 = 0.0(0\%)$ $\phi_2 = 0.01 \cdot 10^{-11}(10\%)$ $\phi_1 = 0.00(0\%)$ $\phi_0 = 0.09 \cdot 10^{-11}(90\%)$

## 4.2 Analyse des images optiques obtenues avec des sondes multimodes

Après avoir étudié l'installation des modes, et exposé le calcul des flux transmis dans chaque mode guidé de la sonde, nous allons maintenant étudier les différents aspects liés à la formation des images optiques, avec une sonde multimode quand elle balaye au-dessus d'un objet de taille sub-longueur d'onde. Nous considérons le même objet que celui déjà étudié dans le cas d'une sonde monomode : section  $100 \times 100nm^2$  et indice égal à 1.458.

### 4.2.1 Sonde de diamètre $D = 4\mu m$

Pour commencer l'étude de la série des sondes multimodes, nous considérons une sonde de diamètre  $D = 4\mu m$  qui se déplace au dessus d'un objet à hauteur constante. Nous avons considéré trois types de sonde en faisant varier l'angle de la partie cônica  $\varphi = 10^\circ, 20^\circ$  et  $30^\circ$  et pour chaque type, le rayon d'apex prend les valeurs suivantes :  $a_3 = 10, 50$  et  $100\text{ nm}$ .

Puisque la dimension de la sonde multimode est très supérieure à celle des sondes monomodes envisagées, nous nous sommes posés la question de connaître le rapport entre le flux transmis par les modes de la sonde et le flux "parasite" qui arrive dans la zone homogène 1 sans être transmis par la sonde. Nous avons donc calculé le signal collecté dans les deux cas suivants :

- Calcul classique sans frontière entre la zone modulée et la zone d'air correspondant à la sortie de la sonde.

- Calcul avec absorbant : une couche absorbante de hauteur de  $3\mu m$ , d'indice  $1 + j0.1$  est placée en haut de la zone modulée avant la zone d'air correspondant à la sortie de la sonde.

Ces calculs ont été effectués pour une sonde dont l'apex a un rayon  $a_3 = 100\text{nm}$  et pour les trois valeurs de  $\varphi = 10^\circ, 20^\circ$  et  $30^\circ$ . Les résultats sont représentés sur la Fig.4.2.

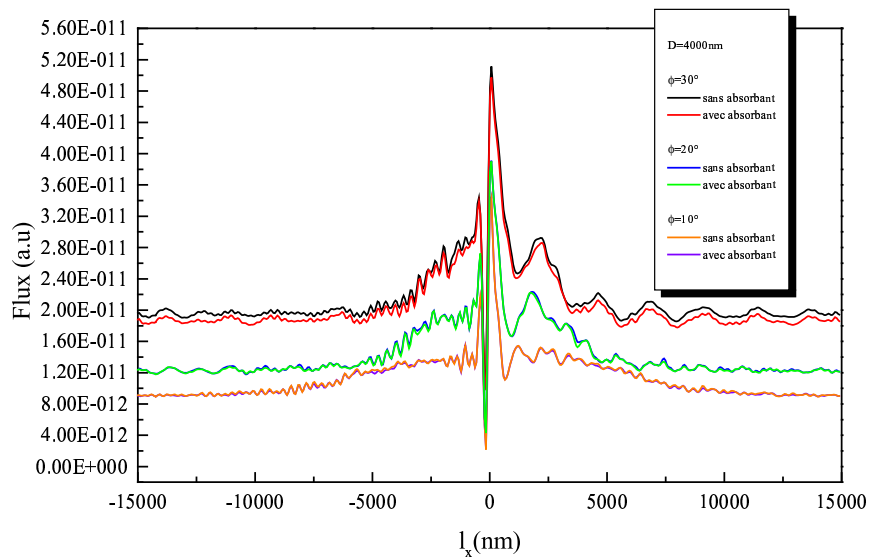


FIG. 4.2: Les signaux transmis par les différentes sondes avec et sans absorbant.  $D = 4\mu m$ ,  $a_3 = 100\text{nm}$ . Seul  $\varphi$  varie:  $10^\circ, 20^\circ$  et  $30^\circ$ .

Nous observons, que la différence entre le signal collecté avec et sans absorbant aug-

mente légèrement avec l'angle du cône  $\varphi$ . Cette différence est quasi-nulle pour  $\varphi = 10^\circ$  et reste inférieure à 2% pour  $\varphi = 30^\circ$ . Il est évident que plus l'angle est petit plus le taper est long, et par conséquent meilleur est le rendement de collection du champ diffusé par l'objet. Dans tous les cas considérés, 98% au moins du champ diffusé par l'objet est collecté par la sonde. Il y a donc 2% du champ diffusé qui arrive à la zone d'air sans être passé à travers la sonde. Ce résultat nous permet d'évaluer l'erreur commise si on supprime les absorbants entre la zone modulée et la zone 1.

Maintenant, nous étudions l'influence des différentes formes de sonde en présentant dans la Fig.4.3(a)-(c), le flux transmis par les trois sondes. La partie guidante des sondes est de longueur constante  $a_1 = 9\mu m$  tandis que la longueur de la partie conique peut atteindre  $a_2 = 11.60\mu m$  pour  $\varphi = 10^\circ$  et  $a_3 = 10nm$ . La longueur totale de ces sondes varie entre  $16\mu m$  et  $21\mu m$ . En appliquant l'analyse modale exposée au paragraphe précédent, ces sondes de diamètre  $4\mu m$  possèdent 14 modes propres. Les calculs sont effectués pour une période  $d = 60\mu m$  et un nombre de modes  $2N + 1 = 1025$ , pour être dans des conditions correctes comme nous l'avons déjà vu au chapitre 2.

Avant de commenter ces résultats, nous présentons aussi sur la Fig.4.4(a)-(c), les flux transmis relatifs aux modes d'ordres faibles (de 0 à 4) ainsi que le flux total pour une sonde d'angle  $\varphi = 10^\circ$  et  $a_3 = 10, 50$  et  $100nm$  (les autres sondes montrent le même comportement pour  $\varphi = 20^\circ$  et  $\varphi = 30^\circ$ ). Nous remarquons que pour les trois cas que c'est le mode fondamental ( $\beta_{14}$ ) qui est majoritairement excité dans la sonde. Ceci est du en partie à la forme de l'apex de la sonde qui est symétrique et centré et aussi à l'angle  $\phi$ . En effet, en faisant les mêmes calculs pour une sonde qui ne possède ni taper ni apex ( $\phi = 90^\circ$  et  $a_3 = 0$ ), nous avons remarqué que les modes d'ordres élevés qui sont principalement excités. Ceci est justifié par le fait qu'en éclairant avec un angle  $\theta = 60^\circ$ , par continuité dans le corps de la fibre les rayons ne sont pas totalement réfléchis, ce qui génèrent plus de modes d'ordre élevés à pertes.

Revenons maintenant aux courbes de la Fig.4.3(a)-(c). Le flux transmis varie de la même manière que dans le cas d'une sonde monomode, mais il y a des différences que nous devons discuter en détail. En effet, comme dans le cas de la sonde monomode (voir Fig. 3.9 du chapitre 3), le flux transmis présente un pic central net, quand la sonde passe au-dessus de l'objet. La structure du champ se trouve ici localement confinée. Des oscillations de grande amplitude apparaissent de part et d'autre de ce pic. Ces oscillations sont légèrement différentes en amplitude et en période par rapport a celles observées sur la Fig. 3.9, et elles s'étalent de quelque micron de part et d'autre de l'objet.

La deuxième différence entre les signaux collectés par une sonde multimode et une sonde monomode est l'apparition systématique sur les courbes de la Fig.4.3 d'un renflement central généralement étalé sur une distance de  $20\mu m$  autour du pic central indiquant la présence de l'objet. L'apparition et l'étalement de ce renflement ne sont donc pas liés directement à la taille de l'apex ni à la valeur de  $\varphi$ . Nous notons cependant que l'allure du renflement évolue avec  $\varphi$ : il est plus arrondi si  $\varphi$  est faible que si  $\varphi$  est grand. Son amplitude (quotient de la valeur moyenne au voisinage du pic central par la valeur

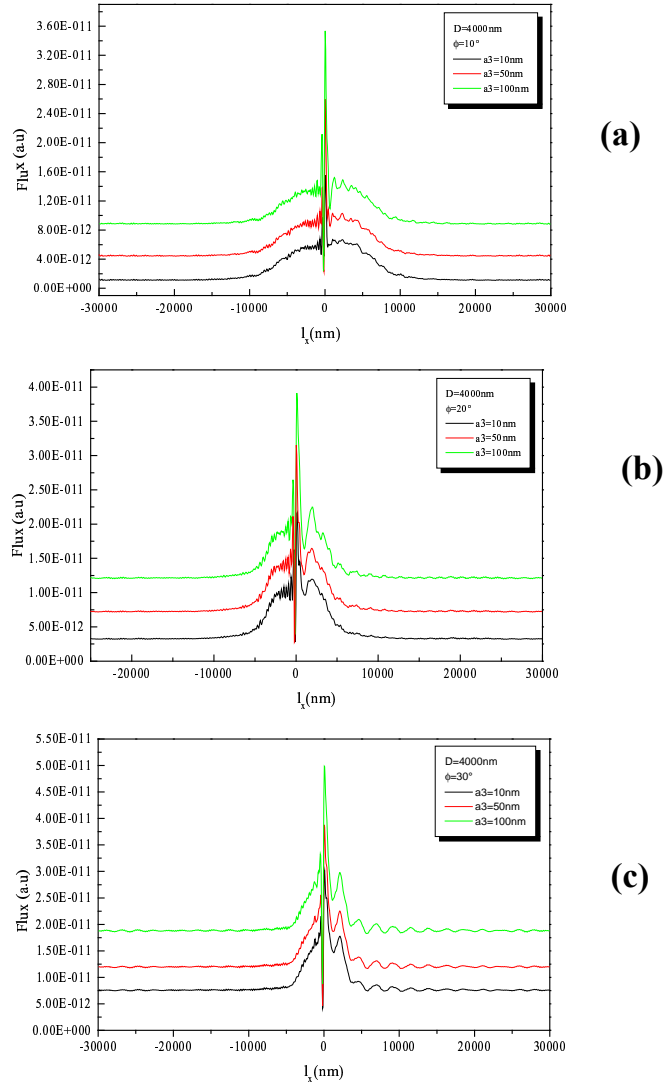


FIG. 4.3: Signal transmis par différentes sondes de diamètre  $D = 4\mu m$  mais dont les paramètres d'apex et de taper varient.

moyenne loin de l'objet) varie nettement avec  $\varphi$  et peu avec l'ouverture  $a_3$  de l'apex. Une explication plutôt intuitive pour justifier l'origine de ce renflement est de la lier à la diffusion de l'objet et à "l'inclinaison" de la partie conique de la pointe. Pour fonder cette interprétation, nous présentons sur la Fig.4.5, le diagramme de diffusion de l'objet sans sonde aussi que les courbes de perturbation induites par la sonde pour les trois valeurs  $\varphi$  lorsque  $a_3 = 50nm$ .

Le lobe assymétrique arrondi présente la diffusion de l'objet, et donc tous les modes

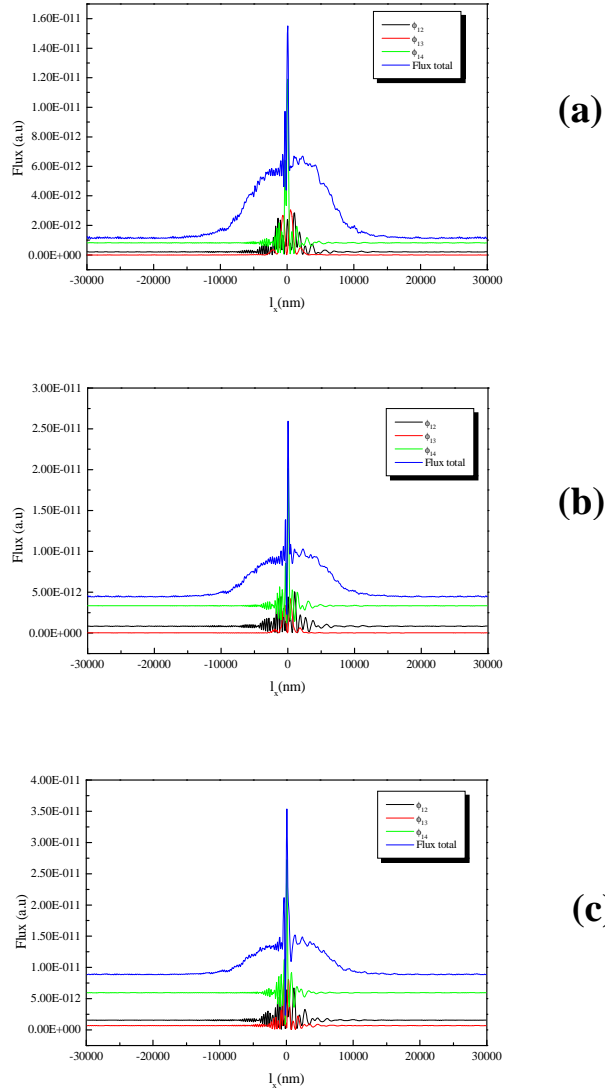


FIG. 4.4: Flux total et les flux partiels relatifs aux modes propres d'ordre 2, 1 et 0. La sonde est de diamètre  $D = 4\mu m$  et possède 14 modes propres. (a)  $a_3 = 10nm$ , (b)  $a_3 = 50nm$  et (c)  $a_3 = 100nm$ .  $\phi = 10^\circ$ .

radiatifs émis par l'objet. Cette courbe a été obtenue en utilisant la formule de diffraction des réseaux [Nevière et Popov 03]. La forme du lobe dépend à la fois de l'angle d'incidence, des indices de réfraction des différents milieux et de la longueur d'onde  $\lambda$ . D'après cette figure, le renflement dépend de la taille de la partie conique de la sonde par  $a_2$  et  $\varphi$ . Si nous comparons la perturbation due aux trois sondes, nous pouvons voir que lorsque, l'angle  $\varphi$  diminue, la taille de la partie cône augmente, et par conséquent, la sonde aura tendance à collecter plus de modes radiatifs. Ce résultat est bien vérifié, quand nous

observons le flux transmis (Fig.4.3 (a)-(c)), pour les trois apex  $a_3$ , et pour les trois angles  $\varphi$ . En comparant le comportement du renflement, pour les trois angles, nous remarquons que pour  $\varphi=30^\circ$ , le renflement est plus localisé (il est étalé latéralement sur une distance de  $8\mu m$ ) et son amplitude est de  $0.85 \cdot 10^{-11}$ . Pour  $\varphi=20^\circ$ , le renflement est étalé sur une distance plus large de l'ordre de  $12\mu m$  mais son amplitude diminue, elle est égale à  $0.63 \cdot 10^{-11}$ . Le renflement s'étale encore plus à une distance  $17\mu m$  pour  $\varphi=10^\circ$ , et son amplitude diminue considérablement par rapport aux angles des taper précédents, elle est égale à  $3.85 \cdot 10^{-12}$ .

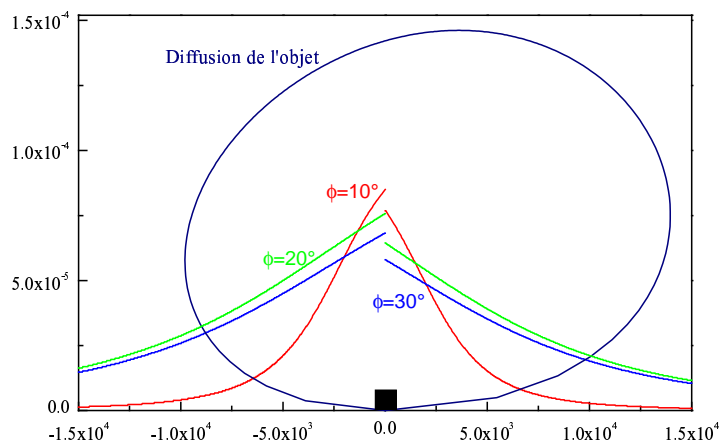


FIG. 4.5: Diagramme de diffusion de l'objet et profil des perturbations dues aux sondes de diamètre  $D = 4\mu m$ ,  $\varphi=10^\circ$ ,  $\varphi=20^\circ$  et  $\varphi=30^\circ$

Un autre détail très important est la position de la sonde par rapport à l'objet qui influence fortement la forme de ce renflement. En effet, quand on observe les différentes courbes, nous constatons qu'il y a une différence entre le niveau de l'intensité collectée, juste à gauche et juste à droite de l'objet, elle est apparente sur les courbes de la Fig.4.3(a)-(c). Cette différence de niveau est liée à l'éclairage asymétrique comme dans le cas monomode, et cette différence est conforme à la dissymétrie du lobe de la diffusion par l'objet seul. Enfin, plus la sonde est éloignée de l'objet plus le renflement a tendance à diminuer jusqu'à disparaître, ce qui est logique car plus la sonde s'éloigne latéralement de l'objet, moins elle collecte les modes radiatifs.

## 4.2.2 Effet de la taille de l'objet

D'après les résultats précédents la taille de l'objet a aussi un effet sur le signal collecté par la sonde. Avant d'aborder des sondes de taille plus large, nous allons considérer une sonde multimode de diamètre  $D = 4\mu m$  avec une partie conique d'angle  $\varphi=30^\circ$  et un

apex est de rayon  $a_3 = 50nm$ . Nous calculons le signal collecté par cette sonde pour différents objets de taille :  $10 \times 10(nm^2)$  et  $50 \times 50(nm^2)$  et les résultats sont représentés sur la Fig.4.6. La sonde passe toujours  $10nm$  au dessus de la face supérieure de l'objet. Le signal transmis dans la sonde pour l'objet de taille  $100 \times 100(nm^2)$  est rappelé sur la Fig.4.6(c). Comme nous pouvons l'observer, l'intensité du signal collecté dépend fortement de la taille de l'objet, plus l'objet est petit plus la distance sonde-substrat est faible et plus l'intensité collectée par la sonde augmente. En effet la distance entre la sonde et le substrat est de  $20nm$  en (a) et de  $60nm$  pour l'objet en (b) et  $110nm$  en (c), ce qui est justifié aussi par les valeurs moyennes du signal collecté. La deuxième différence observée est la disparition du renflement quand la taille de l'objet diminue. Dans ces trois cas, l'amplitude du pic central lorsque la sonde passe au dessus de l'objet est donnée par : (a)  $8 \cdot 10^{-12}$ , (b)  $1.4 \cdot 10^{-11}$  et (c)  $3.5 \cdot 10^{-11}$ . Ceci est conforme à la variation de la forme du lobe de diffusion de l'objet seul quand sa taille décroît.

### 4.2.3 Etude des sondes larges: $D = 10\mu m$ et $D = 25\mu m$

Nous allons maintenant augmenter le diamètre de la sonde, pour étudier l'effet de la taille de la sonde dans la détection du champ proche de l'objet. Nous considérons d'abord une sonde de diamètre  $D = 10\mu m$ , et nous faisons varier, comme dans l'étude précédente, la taille de la partie conique et de l'apex. Nous allons considérer uniquement des sondes d'angle  $\varphi=10^\circ$  et les trois apex  $a_3 = 10, 50$  et  $100 nm$ . L'objet est de taille  $100 \times 100(nm^2)$ . Nous présentons sur la Fig.4.7, le signal transmis à travers cette sonde pour les mêmes conditions de balayage que lors de l'étude précédente.

En observant attentivement ces différentes courbes, nous pouvons dire que l'image optique enregistrée par la sonde multimode est le résultat de trois contributions, que nous allons développer en détails, et relier aux différents paramètres du système sonde-objet.

1- Nous remarquons sur les différentes courbes de la Fig.4.7, que lorsque la sonde est latéralement éloignée de l'objet, le flux transmis a la même valeur quelle que soit la valeur de  $D$ . Le signal est de l'ordre de  $0.45 \cdot 10^{-11}$  pour la sonde de diamètre  $D = 4\mu m$  et d'apex  $a_3 = 50nm$ , de l'ordre de  $0.49 \cdot 10^{-11}$  pour la sonde de diamètre  $D = 10\mu m$  (cas (a)). Les calculs pour cette sonde ont été effectués pour une période de  $d = 80\mu m$ . Nous avons augmenté la période à  $d = 100\mu m$  et la valeur du signal est alors de  $0.45 \cdot 10^{-11}$ ; nous concluons que l'effet de perturbation des cellules voisines augmente le signal de 1% pour  $D = 10\mu m$  et  $d = 80\mu m$ . Ces observations se vérifient aussi pour les deux autres tailles d'apex  $a_3 = 10$  et  $100nm$ . En effet, la valeur du signal détecté quand la sonde est latéralement loin de l'objet est liée à la frustration par la sonde du champ évanescent du substrat, et elle dépend comme nous l'avons montré de la taille de l'apex et de la partie conique: plus l'angle  $\varphi$  est grand, plus l'apex est large, et plus l'intensité collectée est importante. Pour confirmer ce résultat, nous avons aussi calculé le flux transmis par une sonde de diamètre  $D = 25\mu m$ , et pour les mêmes taille d'apex et angle  $\varphi$ . Les résultats sont reportés sur Fig.4.8. en choisissant une période de  $d = 100\mu m$ . Nous choisissons de

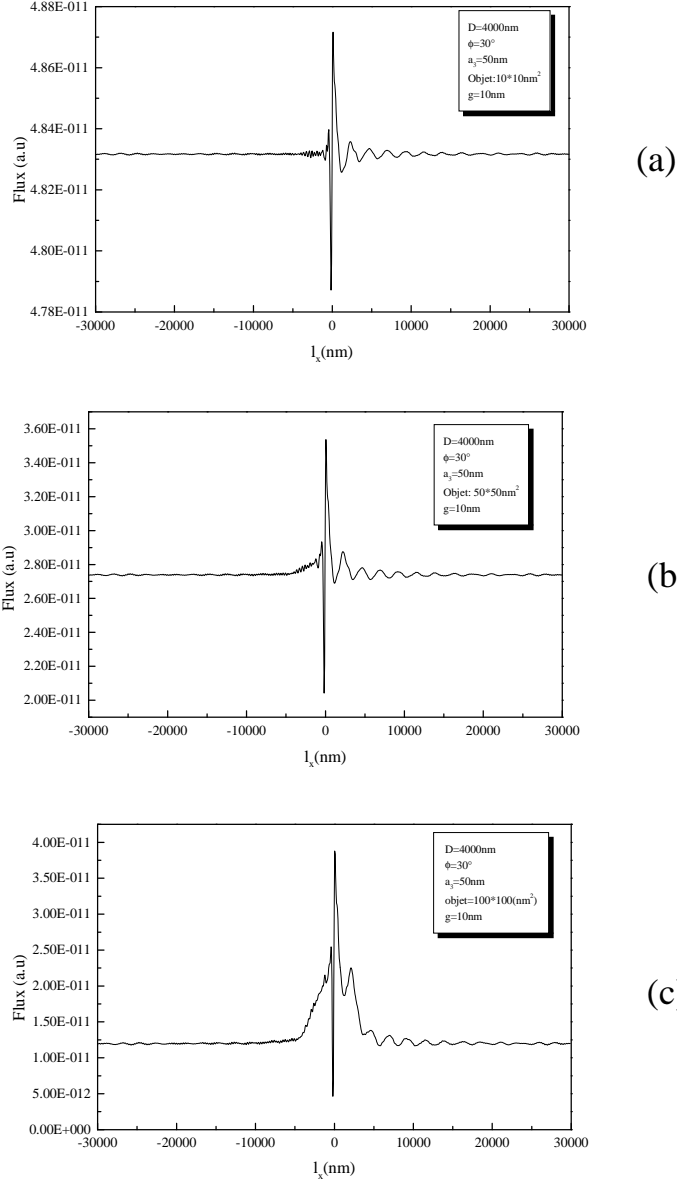


FIG. 4.6: Signal transmis à travers une sonde de diamètre  $D = 4\mu m$ ,  $\varphi=30^\circ$  et d'apex  $a_3 = 50nm$  pour différentes tailles de l'objet (La distance sonde-objet est constante  $g = 10nm$ , ce qui implique la variation de la distance sonde-substrat).

les présenter à un domaine limité à  $40\mu m$  pour faciliter les comparaisons dans la zone centrale des courbes.

Lorsque cette sonde d'apex  $a_3 = 50nm$  et  $D = 25\mu m$  est très éloignée latéralement de l'objet, que l'intensité du signal est de  $0.79 \cdot 10^{-11}$  au lieu de  $0.45 \cdot 10^{-11}$ . Cette différence est



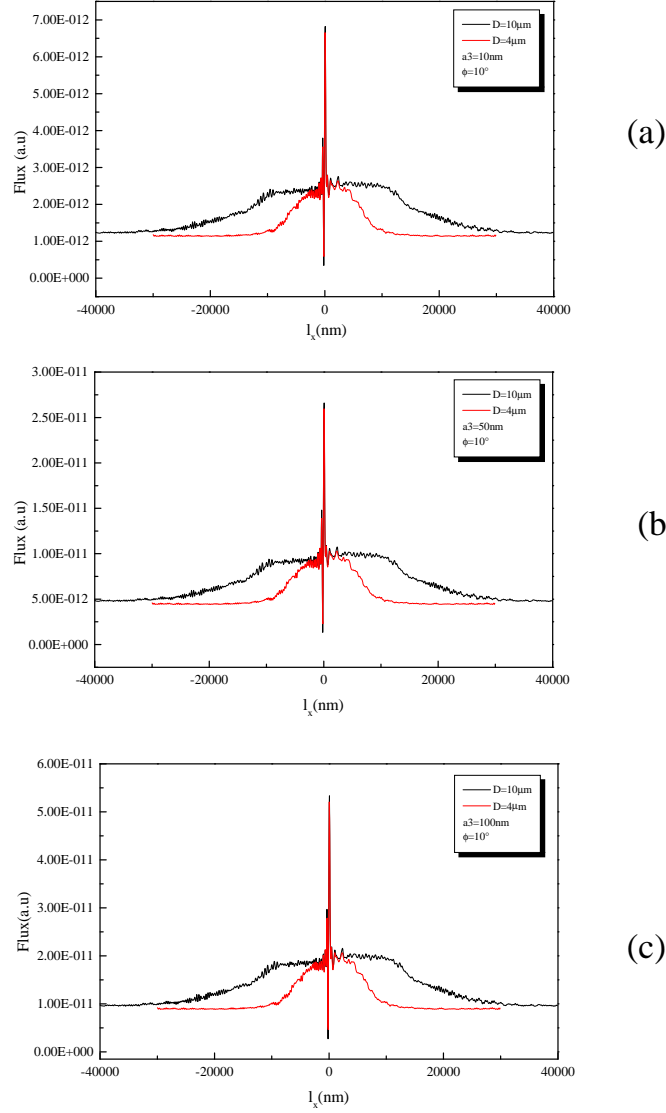


FIG. 4.7: Signal transmis à travers une sonde de diamètre  $D = 10 \mu\text{m}$  en comparaison avec le signal collecté dans les mêmes conditions par une sonde de diamètre  $D = 4 \mu\text{m}$  et de même géométrie de sonde.

dû au fait que la période considérée n'est pas suffisante pour éliminer la perturbation des sondes voisines. En effet, ce problème est relatif à la nature périodique de notre méthode et au modèle global. Il est évident que ces problèmes sont de plus en plus difficiles à surmonter (au moins de point de vue numérique), quand la taille de nos systèmes devient réaliste. Notons que nous avons étudié une sonde diamètre  $D = 25 \mu\text{m}$ , dont la longueur de la partie guidante est de  $20 \mu\text{m}$ , avec un taper de  $20 \mu\text{m}$  pour un angle  $\phi = 10^\circ$ . En

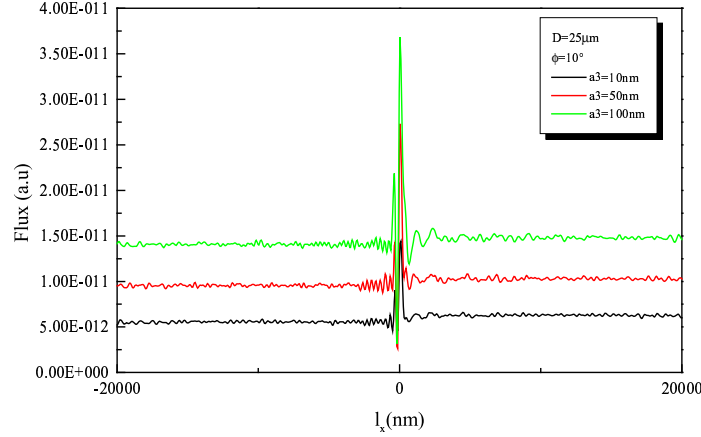


FIG. 4.8: Signal transmis à travers une sonde de diamètre  $D = 25\mu m$  de différents tailles d'apex et  $\varphi=10^\circ$ .

augmentant la période à  $d = 120\mu m$  et le nombre de modes  $2N + 1 = 1281$ , nous obtenons la courbe du signal tracée sur Fig.4.9. Dans ce cas, le signal est passé de  $0.79 \cdot 10^{-11}$  à  $0.65 \cdot 10^{-11}$  (diminution de 20%) quand la sonde est latéralement loin de l'objet. Et si nous agmentons encore la période, la valeur du signal collecté loin de la sonde tend vers  $0.45 \cdot 10^{-11}$ . Rappelons ici que c'est pour des raisons de temps de calcul que nous n'avons pas effectué les calculs pour des périodes plus grandes. Bien que cet inconvénient puisse affecter les résultats, nous serons en mesure d'évaluer la perturbation dûe aux cellules voisines et donc d'apporter une correction si nécessaire.

2-En observant les Fig.4.7, quand la sonde passe au-dessus de l'objet, le signal lié à la diffusion de l'objet se traduit par un renflement central qui a une étendue latérale très différente lorsque  $D$  varie. La forme de ce renflement dépend aussi de l'angle de la partie conique, et dans une moindre mesure de la taille de son apex comme nous l'avons déjà mentionné au paragraphe 4.2.1. Quand on compare les intensités du flux transmis en fonction des tailles d'apex, nous trouvons une variation de  $0.2 \cdot 10^{-11}$  pour  $a_3 = 10nm$  à  $1.00 \cdot 10^{-11}$  pour  $a_3 = 100nm$ . Sur toutes les courbes, la dissymétrie du renflement attribuées à la dissymétrie d'éclairage est nettement visible.

3- Dans toutes les courbes et pour toutes les sondes étudiées, le signal transmis présente un pic intense localisé sur 1 à  $2\mu m$  quand la sonde passe au dessus de l'objet. Dans ce cas, en plus des 2 contributions précédentes, la sonde est très proche de l'objet et une partie importante de son champ évanescent est convertie en champ propagatif.

Enfin, nous remarquons que l'intensité liée à la diffusion de l'objet est dissymétrique. On enregistre un écart de l'ordre de 3%, ce qui est compatible avec ce que nous avons obtenu par le modèle simpliste enregistrant l'intensité diffusée uniquement par l'objet (Fig.4.5). Cet écart qui est lié à l'éclairage dissymétrique du système n'a jamais été révélé

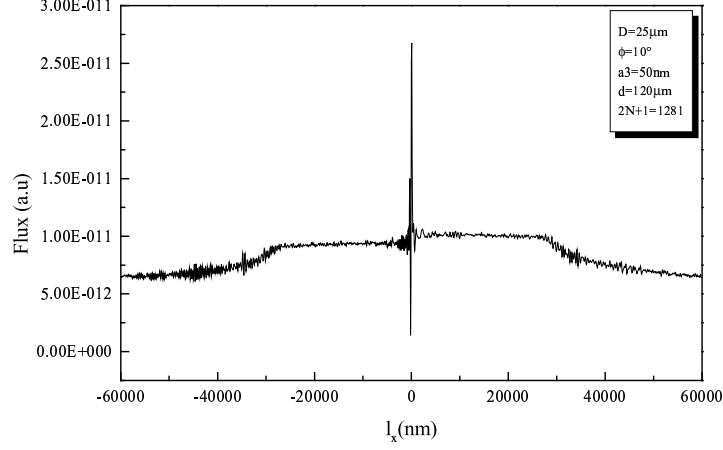


FIG. 4.9: Signal transmis à travers une sonde de diamètre  $D = 25\mu m$ , d'apex  $a_3 = 50nm$  et  $\varphi=10^\circ$ . La période est  $d = 120\mu m$  et le nombre de modes  $2N + 1 = 1281$

expérimentalement peut être lié à un effet de notre modèle global 2D de la sonde qui a tendance à amplifier la valeur du signal diffusé par l'objet. Il peut être aussi lié au fait que la distance de balayage est de l'ordre de  $100\mu m$  pour un objet de taille latérale de  $100nm$ , ce qui ne correspond pas aux pratiques expérimentales où l'on effectuera forcément un balayage plus réduit si on étudie un si petit objet.

### 4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons élargi l'application de notre modèle global à l'étude des sondes multimodes de tailles presque réalistes. A notre connaissance, il n'existe pas d'autres travaux théoriques, qui ont pu atteindre de telles dimensions pour les systèmes sonde-objet alors que notre modèle permet de s'en approcher sans problème.

A travers la combinaison de l'analyse modale et notre méthode, nous sommes en mesure d'évaluer les différentes contributions des flux transmis dans les modes propres de la sonde. Dans tous les cas étudiés, le mode fondamental est toujours majoritairement excité.

L'application de notre modèle à des sondes multimodes de dimensions du même ordre de grandeur que les sondes réelles permet de bien séparer les trois contributions au signal détecté:

- La contribution liée au substrat lorsque la sonde est latéralement éloignée de l'objet, elle est symétrique par rapport à l'objet.
- La contribution liée à la diffusion par l'objet correspondant au renflement central et dont la dissymétrie rend compte des conditions d'éclairage. Ce phénomène ne semble pas

avoir été mis en évidence expérimentalement. Une raison est que, avec les tailles des sondes réelles, il faudrait balayer sur plusieurs centaines de microns avant de passer du lobe de la diffusion à la seule contribution du substrat, et ceci ne correspond pas aux expériences, où l'on reste généralement sur le plateau du renflement. De plus la dissymétrie n'a jamais été mentionnée non plus. Il est fort probable que la valeur obtenue dans notre modèle (3% de variation d'intensité) lorsqu'on passe d'un coté à l'autre de l'objet est exagérée par le fait que nous travaillons sur un système 2D périodique.

- La contribution localisée autour de la position géométrique de l'objet (pic central) résulte de la diminution de la distance sonde-objet par rapport à la distance sonde-substrat. Elle permet de détecter effectivement l'objet lorsqu'on analyse le signal arrivant sur la détection, elle ne permet pas cependant une localisation très précise de cet objet car le pic observé à toujours une largeur supérieure aux dimensions de l'objet.

A travers ce chapitre, nous avons effectué une première étude de sondes de taille réaliste. Notre modèle a permis de détailler tous les différents paramètres, physiques et/ou numériques pour implémenter des tailles jusqu'à  $100\mu m$ . Bien que la périodicité de la méthode différentielle ait "limité" notre étude à une période de  $120\mu m$ , le développement des moyens de calculs et la programmation en parallèle, sera la solution concrète à ce problème "momentané".



## Chapitre 5

# Etude en champ proche des images obtenues avec des sondes structurées

Dans ce chapitre, nous allons étendre l'application du modèle global et de la méthode différentielle à la configuration étudiée dans les chapitres précédents mais avec des sondes structurées, ayant une gaine, un coeur. Nous étudierons aussi le cas des sondes monomodes et multimodes, métallisées et non-métallisées. Nous allons traiter deux types de sondes selon le mode de préparation : sondes réalisées par étirage séquentiel et sondes attaquées chimiquement. Les résultats théoriques feront l'objet de comparaison qualitative avec des résultats expérimentaux antérieurement obtenus dans notre groupe.

### 5.1 Position du problème

Depuis le début des années 80, juste après la lancée de la fabrication de fibres optiques, beaucoup d'auteurs [Ohtsu et Kobayashi 04, chapitre1], [Courjon et Bainier 01, chapitre 8] ont mis l'accent sur le fait que la fabrication de la sonde constitue une étape importante pour l'optique de champ proche. Les sondes de haute résolution doivent être fabriquées d'une façon reproductible. Récemment un progrès remarquable a été accompli dans la fabrication des sondes à partir des fibres, en développant différents processus chimiques : attaque chimique et étirage thermique séquentiel et d'autres processus qui combinent les deux modes. En utilisant ces sondes en microscopie de champ proche, des images de haute résolution ont été obtenues, qui ont établi qu'une sonde attaquée chimiquement collecte plus de champ diffusé que celle réalisée par un étirage thermique. Parmi les résultats importants, il s'est avéré qu'une sonde métallisée, dont la pointe possède une extrémité sphérique constitue une sonde plus performante (le niveau du signal collecté est moins perturbé) que les sondes non-métallisées. Une étude théorique a été réalisée par une équipe japonaise [Ashino et Ohtsu 98] sur ce type de sonde, limitée aux derniers micromètres de la sonde, compte tenu de l'espace mémoire nécessaires aux calculs numériques. Dans des sondes étirées de taper d'angle  $60^\circ$  et d'apex de rayon de courbure de  $10nm$ , il était

difficile de traiter globalement la propagation dans toute la sonde. donc l'étude était limitée uniquement au premier micromètre de la partie conique.

Dans le but d'analyser les effets des différents paramètres géométriques de la sonde dans la détection en champ proche, nous allons employer notre modèle global pour étudier des sondes de structures et formes conformes aux réalités expérimentales sans rencontrer aucune limitation.

Dans les schémas de la Fig5.1(a) et (b), nous présentons respectivement les deux types de sondes structurées étirée et attaquée chimiquement qui seront implémentées numériquement avec notre modèle. Dans les deux cas, les sondes possèdent, un coeur de diamètre  $d_c$  et d'indice de réfraction  $n_c$ . La gaine qui l'entoure est d'épaisseur  $d_g$  et indice de réfraction  $n_g$ . Quand les sondes sont métallisées, l'épaisseur du métal est  $e_m$  et son indice de réfraction est  $n_m$ . Le diamètre total des sondes est toujours pris égal à  $D = 25\mu m$ . Nous gardons les mêmes conditions d'éclairage que dans les chapitres précédents.

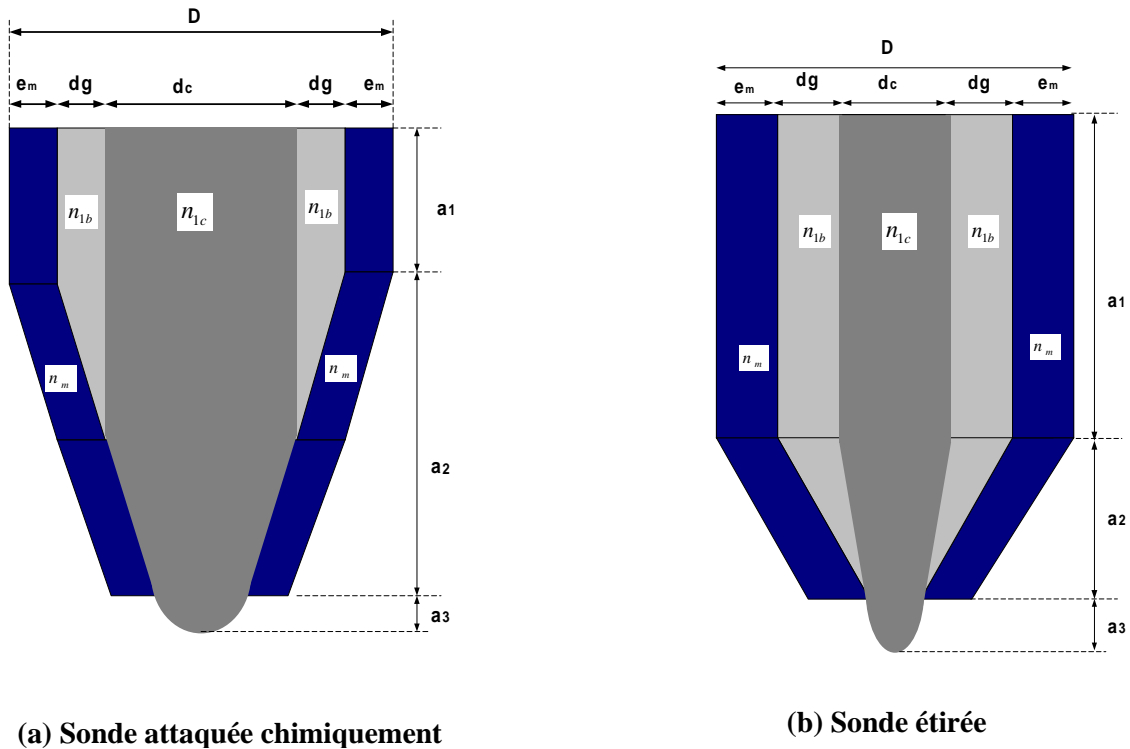


FIG. 5.1: Schéma des sondes structurées

Avant d'exposer les différents résultats relatifs aux sondes structurées de la Fig.5.1,

nous allons commencer par une sonde qui nous servira de référence. On considère une sonde de diamètre  $D = 25\mu m$  avec une partie conique d'angle  $\varphi=30^\circ$ , et la partie rectangulaire  $a_1$  est de longueur de  $20\mu m$ . Cette sonde n'est pas structurée et elle est purement diélectrique et multimode. Le signal collecté par cette sonde balayant à  $10nm$  au-dessus de la face supérieure d'un objet de taille  $100 \times 100(nm^2)$  est présenté sur la Fig.5.2(courbe noire). Nous avons aussi tracé sur la même courbe le signal collecté par la même sonde, quand un absorbant est placé entre la zone modulée et la zone d'air (courbe rouge). Comme on peut l'observer, la différence entre les deux courbes est de  $0.5\%$  au maximum. Ceci est conforme aux résultats déjà trouvés dans le chapitre 4.

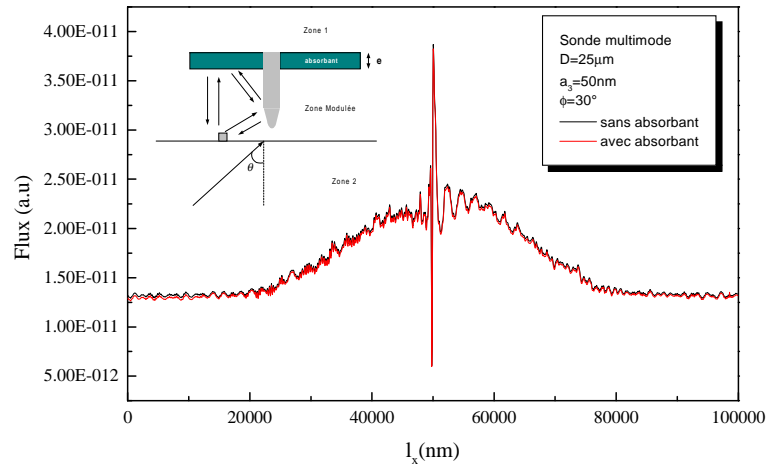


FIG. 5.2: Signal collecté par une sonde multimode non structurée de diamètre  $D = 25\mu m$ , de cône d'angle  $\varphi=30^\circ$ , d'apex  $a_3 = 50nm$ . Les calculs sont effectués dans les deux situations : avec et sans absorbant entre la zone modulée et la zone homogène.

Pour étudier l'effet des variations des paramètres liés à la sonde sur l'intensité du signal collecté, il est nécessaire d'envisager de multiples combinaisons : sonde monomode ou multimode, attaquée chimiquement ou étirée, métallisée ou non-métallisée. Nous avons choisi de fonder un classement sur la nature modale de la sonde étudiée.

## 5.2 Sondes monomodes

Nous présentons ici les images optiques obtenues en utilisant une sonde monomode étirée ou attaquée chimiquement. Le diamètre total de la sonde est de  $25\mu m$ , l'épaisseur du coeur est  $d_c = 600nm$  et son indice de réfraction  $n_c = 1.508$ . Le diamètre de la gaine est donc de  $24.4\mu m$  et son indice de réfraction  $n_g = 1.458$ , l'apex est de rayon  $a_3 = 50nm$  et le cône d'angle  $\varphi=30^\circ$ . La taille de l'objet est de  $100 \times 100(nm^2)$ , et la distance sonde-objet est  $10nm$ . Le mode de détection est toujours à hauteur constante. Compte tenu de tous



ces paramètres opto-géométriques, il y a qu'un seul mode qui est excité et sera couplé au champ collecté dans le coeur de sonde.

Premièrement nous considérons le cas d'une sonde non-métallisée, et nous calculons le signal collecté par une sonde étirée puis une sonde attaquée chimiquement. Les signaux collectés par ces deux sondes sont présentés sur la Fig.5.3.

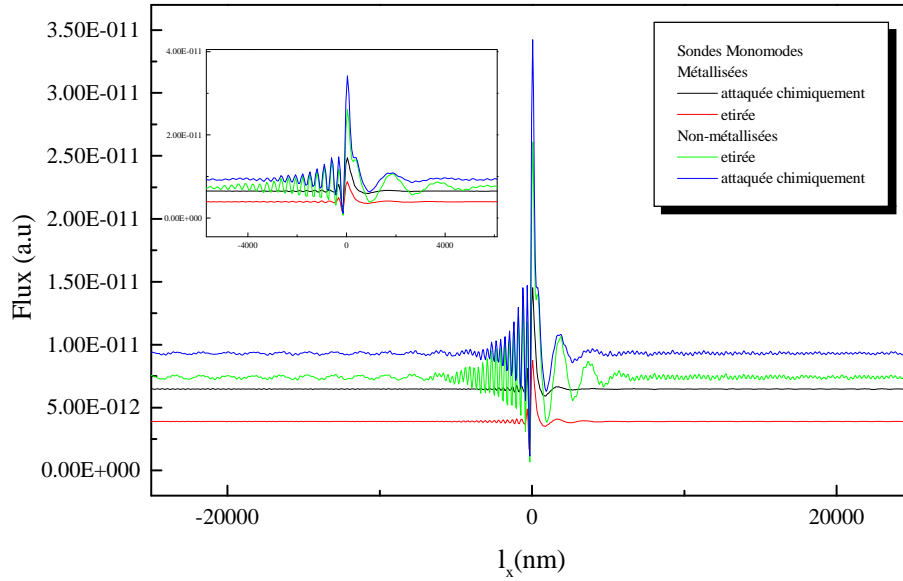


FIG. 5.3: Signal collecté par des sondes monomodes structurées : comparaison entre sonde métallisée et non-métallisée. Le diamètre des sondes est  $D = 25\mu m$ , le taper est d'angle  $\varphi = 30^\circ$  et d'apex  $a_3 = 50nm$ . Le coeur est de diamètre  $d_c = 600nm$  et d'indice de réfraction  $n_c = 1.508$ . Le métal est l'or d'épaisseur  $e_m = 100nm$  et d'indice de réfraction  $n_m = 0.1829 + j3.0894$ . Nous présentons dans l'insert l'agrandissement de l'évolution du pic central.

Comme nous pouvons le constater sur ces deux courbes reportées sur la Fig.5.3, le signal collecté par la sonde attaquée chimiquement est 1.26 fois plus grand que le signal collecté par la sonde étirée. Ceci est en bon accord avec ce qui a été trouvé expérimentalement. En effet, comme on peut le constater à partir des schémas de la Fig.5.1, la partie conique de la sonde attaquée chimiquement s'étend et s'élargit sans être recouverte par la gaine dans la partie conique, alors que ce n'est pas le cas pour la sonde étirée. Ce qui justifie que la sonde attaquée chimiquement ait tendance à collecter plus de champ diffusé que la sonde étirée.

En comparant ces courbes avec le signal collecté par une sonde monomode non-structurée de diamètre  $D = 200nm$  (chapitre 3, Fig.3.6(b)), nous remarquons que le comportement est semblable. Comme dans la Fig.3.6b, le signal transmis présente un pic central quand la sonde passe au-dessus de l'objet. Mais si on compare la valeur du signal

quand la sonde est latéralement loin de l'objet, dans le cas de cette sonde structurée, il est de l'ordre de  $0.93 \cdot 10^{-11}$  pour la sonde attaquée et de  $0.73 \cdot 10^{-11}$  pour la sonde étirée. Dans le cas de la sonde monomode traitée dans le chapitre 3, l'intensité du signal était de l'ordre de  $0.45 \cdot 10^{-11}$ . L'intensité du signal collecté est donc plus importante pour des sondes structurées que pour les sondes non-structurées. Ceci rend compte à la fois de l'influence de la forme de l'extrémité de la sonde et des conditions de guidage dans les deux cas.

Dans une deuxième étape nous métallisons les deux sondes précédentes (voir Fig.5.1), sans couvrir l'apex, avec une couche d'or d'épaisseur  $e_m = 100nm$  et d'indice de réfraction  $n_m = 0.1829 + j3.0894$  [Palik 85]. Le signal collecté par ces sondes métallisées est lui aussi présenté sur la Fig.5.3.

Si nous comparons les courbes du signal collecté par des sondes non-métallisées et métallisées, on constate que :

1-Le signal collecté par les sondes métallisées diminue pour les deux types de sonde, étirée et attaquée. Ceci est dû essentiellement à la couche de métal, qui possède une partie imaginaire importante dans son indice de réfraction et absorbe une partie du champ. Souvent dans les expériences, cette couche de métal ne couvre que la partie guidante (i.e. le corps de la fibre) et aussi la partie conique, l'apex n'est jamais métallisé. Avec cette procédure, on est sûr que le champ transmis par la sonde est principalement collecté par son apex.

2-La sonde attaquée chimiquement, même quand elle est métallisée est toujours plus efficace que la sonde étirée.

3-Les oscillations observées dans les courbes du signal collecté par des sondes non-métallisées sont beaucoup atténuées sur les courbes du flux transmis par les sondes métallisées. Ceci est dû à la couche de métal qui atténue la diffusion du champ proche par la sonde. D'autre part, la métallisation des sondes empêche tout un effet de perturbation qui peut venir des proches voisins et supprime aussi les interactions avec le champ extérieur à la sonde. Ce résultat a deux conséquences importantes (numérique et physique) : l'atténuation de la perturbation par les cellules voisines permet d'envisager une période de la cellule de base inférieure à celle des sondes non-métallisées, et le pic central du signal transmis par les sondes métallisées est plus localisé, car les oscillations dues aux interférences sont atténuées par le métal.

L'inconvénient de la métallisation est que l'intensité du signal détecté diminue. Des études récentes, montrent qu'on peut augmenter le signal dans les sondes métallisées par excitation des plasmons au voisinage de l'extrémité. En effet, ces différentes études ont permis pour un métal et une longueur d'onde particulière de multiplier le module de l'intensité du champ électrique par un facteur  $5 \cdot 10^4$  (Ag à  $380nm$ ). De telles sondes ('plasmon probe') ont été réalisées, moyennant certaines précautions quant à la structure de la fibre [Bouhelier *et al.* 02, Bouhelier *et al.* 03] et par modification des paramètres géométriques de l'apex et de la partie conique [Ohtsu et Kobayashi 04].

### 5.3 Sondes multimodes

Dans cette section, nous présentons les mêmes simulations avec une sonde multimode. On considère les mêmes sondes structurées que précédemment, sauf que le diamètre du coeur est porté à  $d_c = 10\mu m$ . La sonde est alors multimode avec 13 modes guidés.

Comme pour les sondes structurées monomodes, nous avons effectué les calculs du signal transmis pour des sondes non-métallisées et métallisées et les résultats sont reportés sur la Fig.5.4.

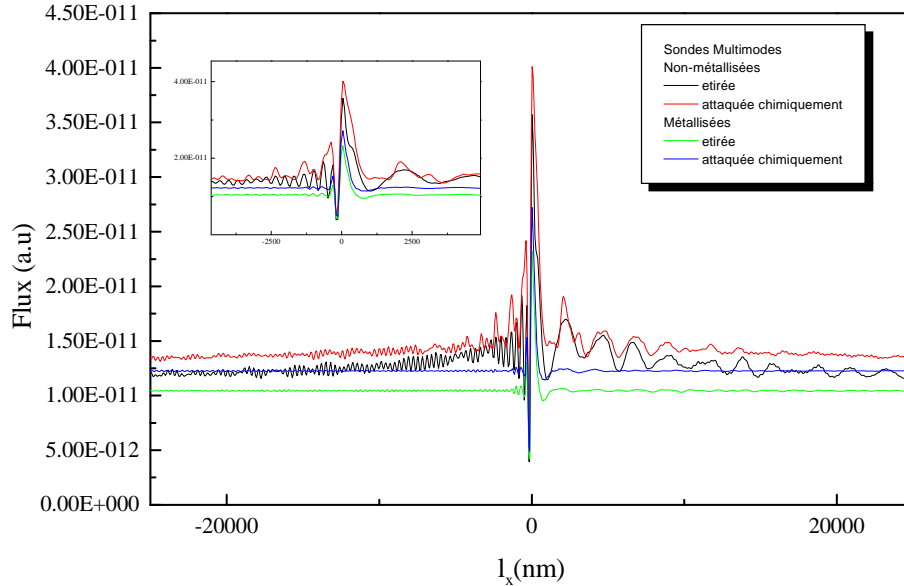


FIG. 5.4: Signal collecté par des sondes multimodes structurées : comparaison entre des sondes métallisée et non-métallisées.  $D = 25\mu m$ ,  $\varphi=30^\circ$  et  $a_3 = 50nm$ . Le coeur est de diamètre  $d_c = 10\mu m$  et d'indice de réfraction  $n_c = 1.508$ . Le métal est l'or d'épaisseur  $e_m = 100nm$  et d'indice de réfraction  $n_m = 0.1829 + j3.0894$ . Nous présentons dans l'insert l'agrandissement de l'évolution du pic central.

En observant attentivement les différentes courbes, on constate différents comportements des sondes multimodes structurées devant un objet sub-longueur d'onde:

1- Pour les sondes non-métallisées, les courbes du signal collecté ne montrent pas le renflement prononcé mis en évidence dans le chapitre 4, et sur la Fig.5.2. Nous pensons que l'échelle balayée est trop faible par rapport aux dimensions de la sonde pour mettre en évidence ce renflement. Bien que la forme du renflement soit liée à l'objet et à la forme de la partie conique de la sonde, la détection du signal transmis est très différente quand on passe des sondes multimodes non-structurées aux sondes structurées.

Les oscillations qui apparaissent de part et d'autre de l'objet sont périodiques et visibles sur tout le domaine balayé mais dans les cas des sondes multimodes, leur amplitude est plus faible que dans le cas des sondes monomodes : ceci peut être justifié par la complexité des conditions d'interférences dans le cas des sondes multimodes, conformément aux résultats déjà trouvés dans le chapitre 4. Comme dans le cas monomode, les sondes attaquées chimiquement collectent plus de signal que les sondes étirées. Enfin, la valeur moyenne du signal est plus importante avec des sondes multimodes qu'avec des monomodes.

2-Pour les sondes multimodes métallisées, les oscillations observées précédemment, disparaissent quand on s'éloigne de l'objet, mais des oscillations restent visibles à quelques microns de l'objet. Ceci est dû à l'existence de la couche d'or qui empêche le champ diffusé par l'objet d'être collecté lorsqu'on s'éloigne de l'objet, alors le champ collecté se stabilise à un niveau fixe. Ce comportement est observé dans les deux cas, sondes étirée et attaquée. Du point de vue calcul numérique, la métallisation des sondes, peut éliminer les interactions entre les sondes des systèmes voisins et permet de limiter la période et par conséquent le nombre de modes  $N$  à prendre en compte et aussi le temps de calcul, comme nous l'avons déjà remarqué dans le cas des sondes structurées monomodes.

En comparant la dynamique du signal transmis quand la sonde passe au dessus de l'objet, avec une sonde métallisée, la résolution est nettement améliorée (le pic central est mieux localisé), bien que la valeur moyenne de l'intensité collectée décroisse avec la métallisation.

## 5.4 Comparaison avec des résultats expérimentaux

Dans le but de valider ces résultats théoriques, nous allons les comparer avec des résultats expérimentaux obtenus dans notre groupe avec des fibres monomodes et multimodes.

Nous disposons de trois types de résultats obtenus avec une sonde multimode attaquée, une sonde monomode étirée non-métallisée et une sonde monomode étirée et métallisée. L'objet considéré est un rail de silice de  $50nm$  de large et  $20nm$  de haut. Les images expérimentales sont réalisées en mode à intensité constante, elles sont présentées sur les Fig. 5.5, Fig.5.6 et Fig.5.7 respectivement. Expérimentalement l'intensité détectée en champ lointain est toujours plus grande avec une sonde multimode qu'avec sonde monomode, il en est de même lors de l'acquisition des images. Ceci est conforme aux résultats obtenus dans les chapitres 3 et 4, où le niveau de base pour les sondes multimodes est plus élevé que pour les sondes monomodes.

Quand on observe les images obtenues en mode intensité constante avec la sonde multimode (Fig.5.5), nous remarquons que lorsque la sonde passe au dessus de l'objet, le pic central est plus étalé et moins élevé en valeur absolue que dans le cas de la sonde monomode (Fig.5.6). Ceci n'est pas le cas des courbes du signal transmis dans les sondes

multimodes dans la configuration à hauteur constante. Cet étalement est retrouvé dans la Fig.5.2 quand la sonde est plus large possède plus de modes excités et ceci confirme ce que nous avons établi dans le chapitre 4 et les résultats de section 3 sur renflement observé.

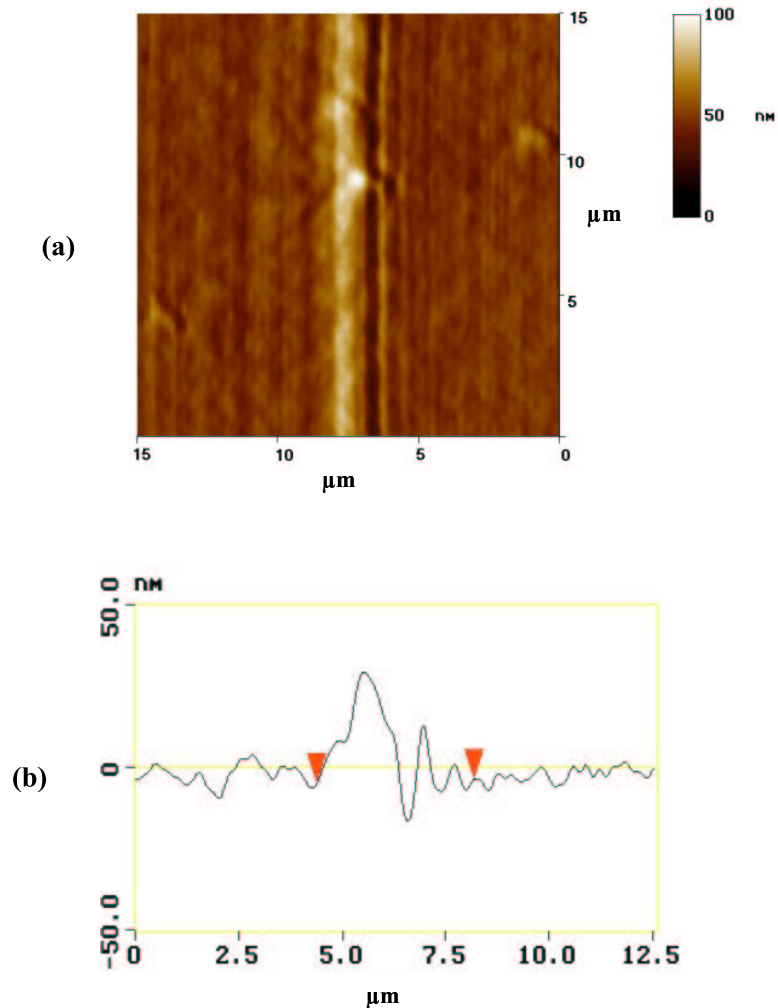


FIG. 5.5: (a) Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde multimode attaquée chimiquement non métallisée dans le mode à intensité constante. L'objet est en silice de  $50\text{nm}$  de large et  $20\text{nm}$  de hauteur. (b) Coupe horizontale effectuée sur l'image optique.

Comme deuxième étape, nous effectuons les calculs correspondant à une ligne de balayage avec notre modèle global pour ces trois sondes. Nous prenons en compte les mêmes conditions d'illumination et les mêmes paramètres géométriques de l'objet que ceux uti-

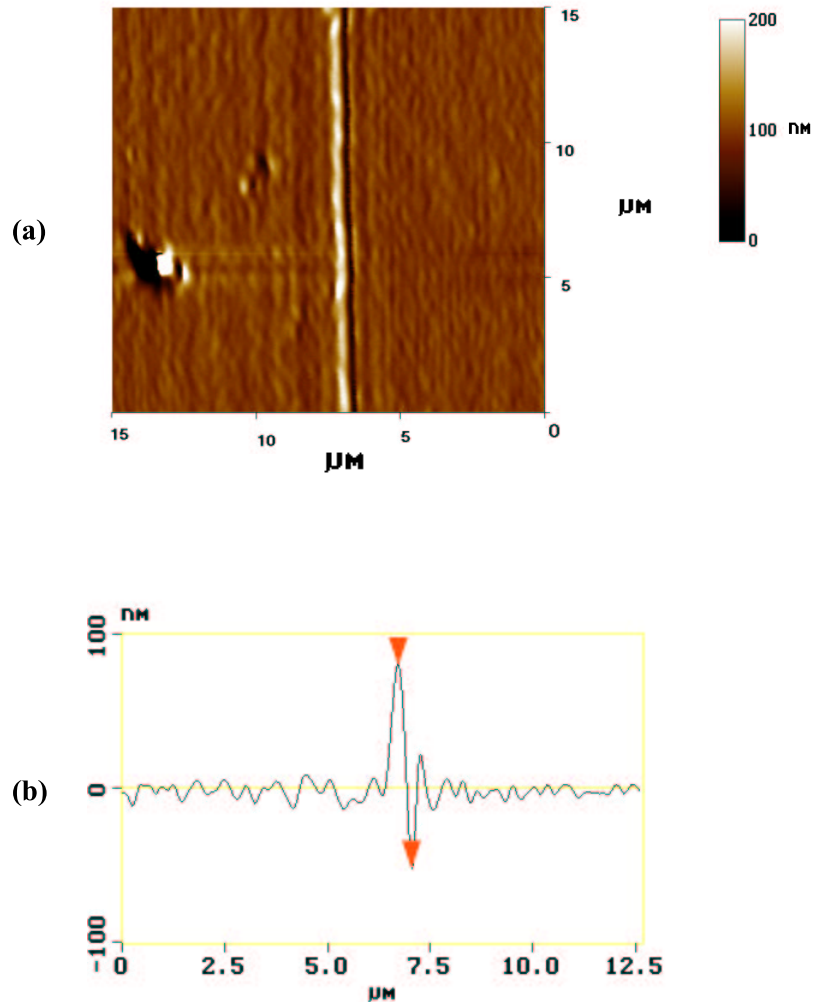


FIG. 5.6: (a) Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde monomode étirée non métallisée dans le mode à intensité constante, l'objet est de taille  $50 \times 20 (nm^2)$ . (b) Coupe horizontale effectuée sur l'image optique.

lisés lors des expériences. Les sondes considérées ont les paramètres suivants:

1. La sonde multimode attaquée chimiquement: coeur  $d_c = 10 \mu m$  et indice de réfraction  $n_c = 1.508$ .
2. Les sondes monomodes: coeur  $d_c = 600 nm$  et indice de réfraction  $n_c = 1.508$ . La métallisation est réalisée par une couche d'or sans recouvrir l'apex.

Les calculs du flux transmis sont effectués pour une période  $d = 100 \mu m$  et un nombre

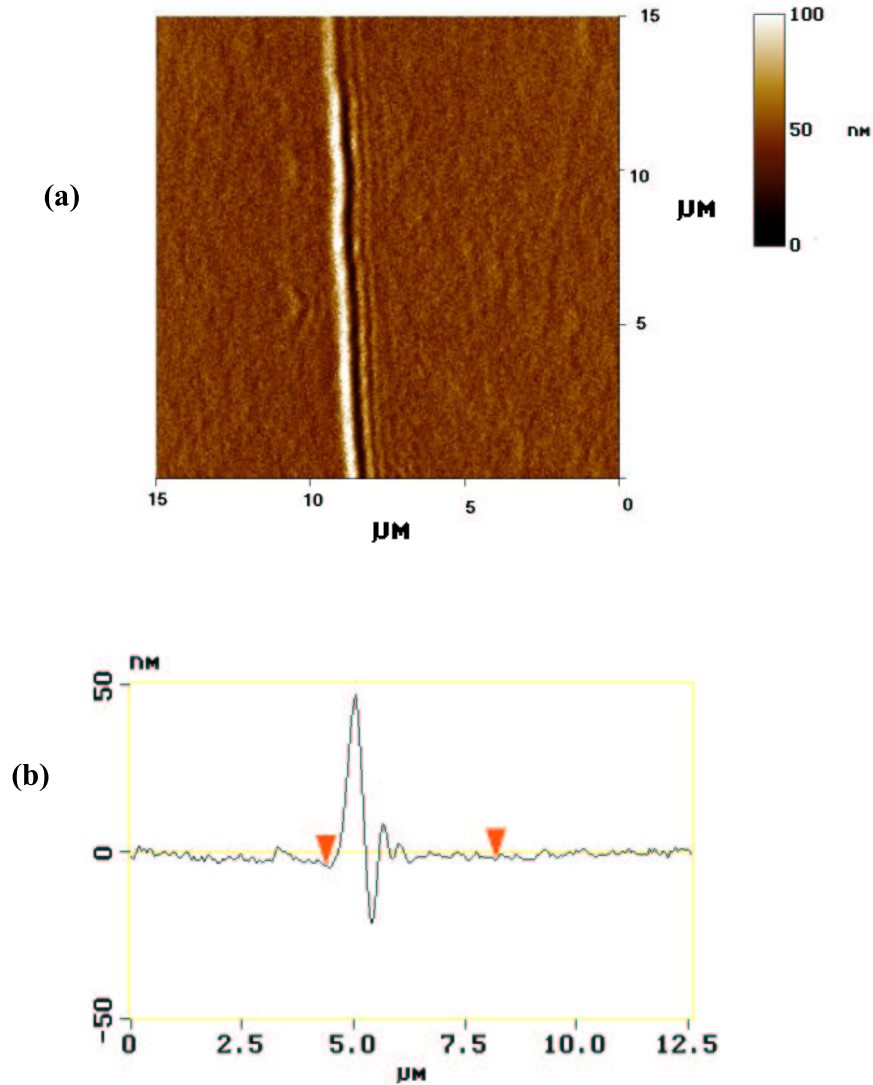


FIG. 5.7: Image expérimentale en champ proche enregistrée avec une sonde monomode étirée métallisée dans le mode à intensité constante, l'objet est de taille  $50 \times 20(\text{nm}^2)$ . (b) Coupe horizontale effectué sur l'image optique.

de modes  $2N + 1 = 1025$  qui suffisent pour obtenir une convergence numérique. Pour être conforme au domaine du balayage expérimental, nous limitons le déplacement sonde-objet à  $15 \mu\text{m}$ . Les courbes théoriques donnant la variation du signal transmis à travers ces trois sondes sont représentées respectivement sur les Fig.5.8. et 5.9.

Nous observons sur ces figures que le signal transmis à travers ces trois sondes, présente

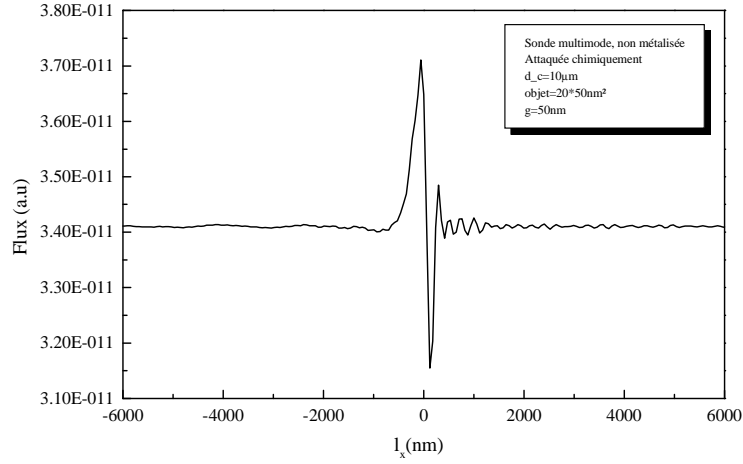


FIG. 5.8: Signal transmis par la sonde multimode non métallisée en mode à hauteur constante. L'objet est de taille  $50 \times 20(nm^2)$  et la distance sonde-objet est  $g = 50nm$

un profil semblable à ceux discutés lors du paragraphe précédent pour l'objet de taille  $100 \times 100(nm^2)$ . Bien que la comparaison entre les images expérimentales et théoriques soit avant tout qualitative, différents aspects de leur formation peuvent être interprétés avec nos calculs. Pour la sonde multimode de la Fig.5.8, la courbe du flux transmis ne monte pas le renflement observé dans les calculs de la Fig.5.2 et dans la coupe expérimentale (Fig.5.5). Ceci est dû au fait que la sonde n'est pas assez large comme dans le cas expérimental, pour exciter plus de modes. Si on augmente la dimension du coeur, on excitera plus de modes, et la courbe du signal transmis fera apparaître le renflement.

Quand on observe le signal collecté par les sondes monomodes, non métallisées (Fig.5.9), nous remarquons que les oscillations qui apparaissent de part et d'autre de l'objet, apparaissent aussi dans le signal collecté par la sonde métallisée, mais avec un amplitude nettement moins importante. Le pic central, qui apparaît quand la sonde passe au-dessus de l'objet émerge mieux à partir du niveau moyen avec la sonde métallisée, il l'est moins avec la sonde non-métallisée. Ce résultat apparaît aussi quand on observe les Fig.5.6 et Fig.5.7, en particulier les lignes des coupes correspondants à chacune des images.

Les différences qui apparaissent dans le comportement des sondes multimodes peut être associé à la différence entre le mode à hauteur constante et intensité constante.

## 5.5 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de franchir une étape nouvelle dans la mise en oeuvre de la modélisation d'un système PSTM réaliste. Nous avons calculé le signal détecté et transmis à travers des sondes proches de celles utilisées expérimentalement :



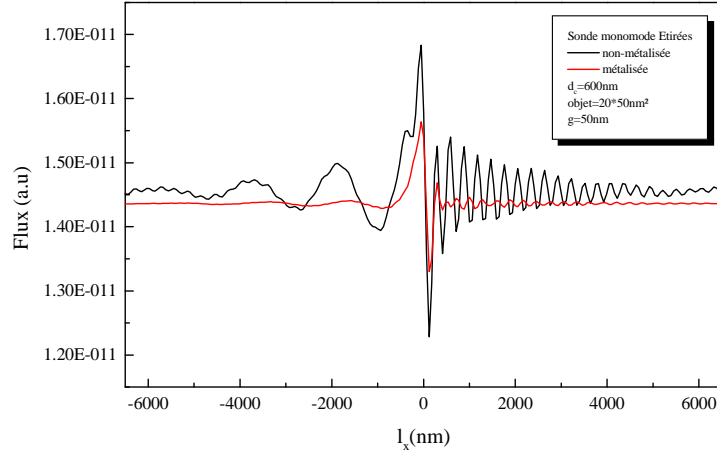


FIG. 5.9: Signal transmis par les deux sondes monomodes : métallisée et non métallisée, le balayage est effectué en mode à hauteur constante, l'objet est de taille  $50 \times 20(nm^2)$ . La distance sonde-objet est  $g = 50nm$  et les caractéristiques géométriques et optiques des sondes sont identiques. La couche d'or autour de la sonde a pour épaisseur  $100nm$

- nous traitons aussi bien les sondes monomodes que les sondes multimodes.
- nous prenons effectivement en compte la structure (coeur et gaine) avec des dimensions et indices conformes aux mises en oeuvres expérimentales.
- nous sommes capables de modéliser différentes formes de pointes pour différencier les sondes attaquées chimiquement ou étirées thermiquement en faisant varier les paramètres  $\varphi$  et  $a_3$  du modèle géométrique.
- nous savons prendre en compte la métallisation éventuelle des sondes.
- nous avons utilisé des dimensions de la partie guidante  $l_p$ , de la fibre (celle qui correspond à  $D = cste$ ) de l'ordre de la dizaine de microns et c'est à notre connaissance, la première fois que de telles longueurs sont prises en compte après un taper déjà de taille réaliste.

Nous avons ainsi présenté l'étude systématique de l'influence des paramètres opto-géométriques du système sur la valeur de l'intensité du signal transmis par les différents types de sonde. Le signal dépend bien sûr de la taille de l'objet mais aussi de la nature (mono ou multimode) et de la taille de la sonde ( $l_p$  et  $D$ ) et de la forme de son extrémité ( $\varphi$  et  $a_3$ ). Nous avons montré le rôle de la métallisation qui accroît la résolution par rapport aux sondes non-métallisées bien que la valeur du signal détecté soit inférieure.

Enfin nous avons pu faire une comparaison entre les résultats théoriques issus des calculs et des images expérimentales d'un même objet obtenues avec des sondes différentes mais que nous savons prendre en compte de façon pertinente dans les simulations.

L'ensemble de ces études permet de conclure que le modèle développé et la méthode mise en oeuvre sont validés et sont utilisables tant pour prédire des résultats et orienter les expériences que pour analyser des résultats expérimentaux. Ce chapitre ouvre sur de nombreuses perspectives qui pourront être mises en oeuvre expérimentalement et théoriquement, comme par exemple : excitation des modes plasmons pour augmenter le signal transmis lors de l'utilisation de sondes métallisées et amélioration de la résolution. La génération d'harmoniques d'ordre 2, peut être aussi explorée, notamment dans la polarisation P, dans le but de surmonter la diminution du nombre des modes guidés causée par la métallisation.



## Chapitre 6

# Etude de l'effet de la sonde dans la détection du champ proche en infrarouge

Le but de ce chapitre est l'étude en champ proche optique de la spectro-microscopie dans le domaine du proche infrarouge. Pour comprendre le comportement de la lumière infra-rouge diffractée par un échantillon, nous avons effectué des calculs numériques avec la méthode différentielle et l'algorithme S-matrix. Notre étude se divise en deux parties : la première consiste à étudier uniquement l'objet sans la présence de la sonde. Pour effectuer ces calculs, nous considérons toujours le cas d'un système à 2 dimensions comportant une symétrie translationnelle dans une des directions. Les résultats que nous présentons ici sont relatifs à la polarisation S, ils sont complémentaires aux résultats récemment publiés en polarisation P [Dazzi *et al.* 04]. La deuxième partie, sera consacrée à l'effet de la sonde dans la détection du champ proche en infrarouge, en utilisant une sonde de chalcogénure (Tellure Arsenic Selenium). Ceci est possible avec le modèle global développé dans ce travail.

### 6.1 Position du problème

La spectroscopie infra-rouge est un outil puissant pour identifier les molécules organiques et le domaine du proche infra-rouge est souvent utilisé pour révéler leur signature moléculaire. La cartographie chimique ou spectro-microscopie est couramment utilisée dans les centres synchrotron où la brillance du faisceau permet d'obtenir une résolution spatiale proche de la limite de diffraction  $\lambda$ . Cependant, dans l'infra-rouge cette limite excède largement la taille de la plupart des espèces intéressantes tels que les cellules vivantes ( $5\mu m - 30\mu m$ ). D'où l'intérêt qu'ont porté les physico-chimistes aux techniques champ proche optique qui leur permettent d'augmenter, en théorie, cette résolution d'un ordre de grandeur.

Durant la dernière décennie, ces nouvelles techniques se sont développées, principalement dans le domaine visible, sans doute à cause du nombre limité de sources accordables dans les autres domaines spectraux. A l'heure actuelle, les lasers à électrons libres et les oscillateurs paramétriques optiques, peuvent couvrir toute la gamme spectrale dans le domaine qui nous intéresse. Et c'est pour cela, que différents groupes ont entrepris de développer un microscope champ proche dans l'infra-rouge type Photon Scanning Tunneling Microscope (PSTM) [Piednoir *et al.* 95]. Des premiers résultats expérimentaux ont montré qu'il était possible de visualiser facilement le doublet d'une substance absorbante centré sur  $3\mu m$  avec cette technique champ proche optique [Gross *et al.* 01, Piednoir *et al.* 96]. Afin d'interpréter les images expérimentales obtenues, nous avons entrepris de modéliser le champ électromagnétique diffusé par des objets absorbants dans la gamme spectrale entourant les bandes d'absorption situées dans l'infra-rouge. Dans ce travail, qui constitue la suite de la collaboration avec un groupe d'expérimentation du Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnétique (LURE) où le cas TM a été étudié (voir Annexe A), nous allons étudier les deux cas: quand la sonde est limitée à un point qui se déplace au dessus de l'échantillon absorbant, et quand la forme de la sonde est prise en compte dans les calculs, comme dans les simulations effectuées dans les chapitres précédents.

## 6.2 Description du système

Dans le PSTM infrarouge nous aurons toujours un échantillon déposé sur la face plane d'un prisme éclairé en réflexion totale par une onde plane. Le champ électromagnétique diffusé par le système prisme-échantillon est collecté en partie par une sonde effilée en son extrémité (voir Fig.6.1). Différents paramètres opto-géométriques (taille de l'objet absorbant encastré, indice de réfraction, paramètres d'éclairage) peuvent être aisément étudiés. Dans ce chapitre, nous avons considéré un échantillon simple : un film homogène d'indice  $n_{1a} = 1.7$  comportant un objet absorbant infini dans la direction  $z$  et possédant une section rectangulaire (taille latérale  $s$  et épaisseur  $e$ ). Cet objet est caractérisé optiquement par un indice de réfraction complexe  $n_{1b}$  dont les parties réelle et imaginaire sont reportées sur la Fig.6.2. en fonction de la longueur d'onde incidente  $\lambda$ , comparable à l'indice de réfraction du polymère de type Poly-Méthyl-Methacrylate (PMMA) utilisé dans les expériences. En effet, nous voyons sur la Fig.6.2 que l'indice de réfraction comporte un doublet caractéristique autour de  $5\mu m$  qui nous permettra d'identifier sa présence sans problème.

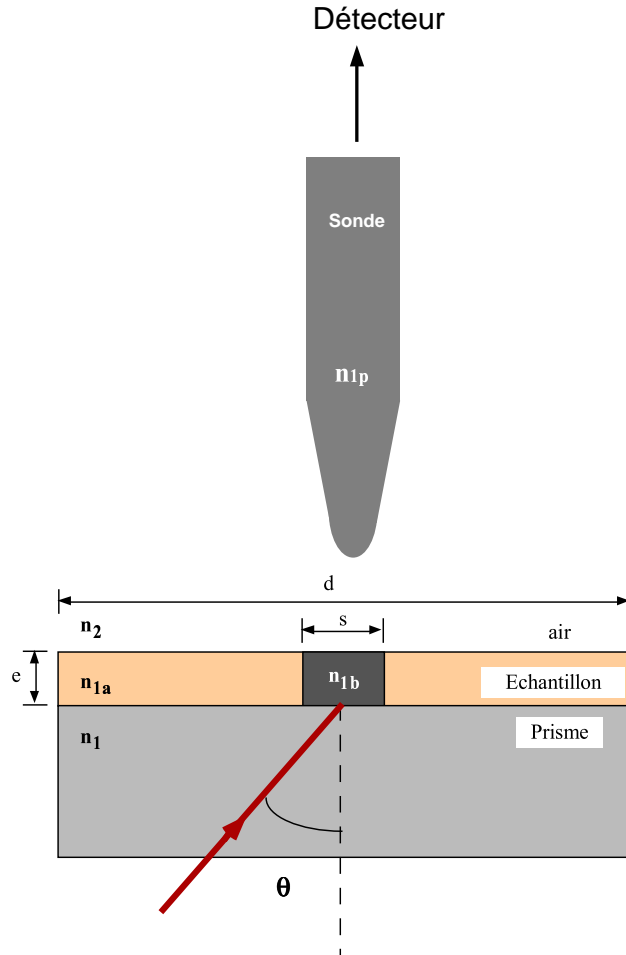


FIG. 6.1: Schéma du dispositif:  $n_1 = 4$  est l'indice de réfraction du prisme,  $n_{1a} = 1.7$  est l'indice de réfraction de l'échantillon,  $n_{1b}$  est l'indice de réfraction de l'objet absorbant encastré,  $n_2 = 1$  est l'indice de réfraction de l'air.  $d$  est la période du système,  $s$  est la taille latérale de l'objet absorbant,  $e$  est son épaisseur.  $\theta$  est l'angle d'incidence. La sonde est modélisée par un guide planaire rectangulaire qui se termine par une partie conique et un apex. Son indice de réfraction est  $n_{1p} = 2.4$

L'angle d'incidence  $\theta$  et les différents indices de réfraction : prisme-échantillon-air, sont choisis tels que la réflexion totale prenne naissance sur l'interface échantillon-air. La détection du champ électrique va s'effectuer en mode à hauteur constante, à une hauteur inférieure à  $\lambda_0/2$ . Le prisme en Germanium est modélisé par un milieu semi-infini dont l'indice de réfraction  $n_1$  est égal à 4 pour  $\lambda_0 = 5\mu m$ . La sonde est de la forme déjà étudiée

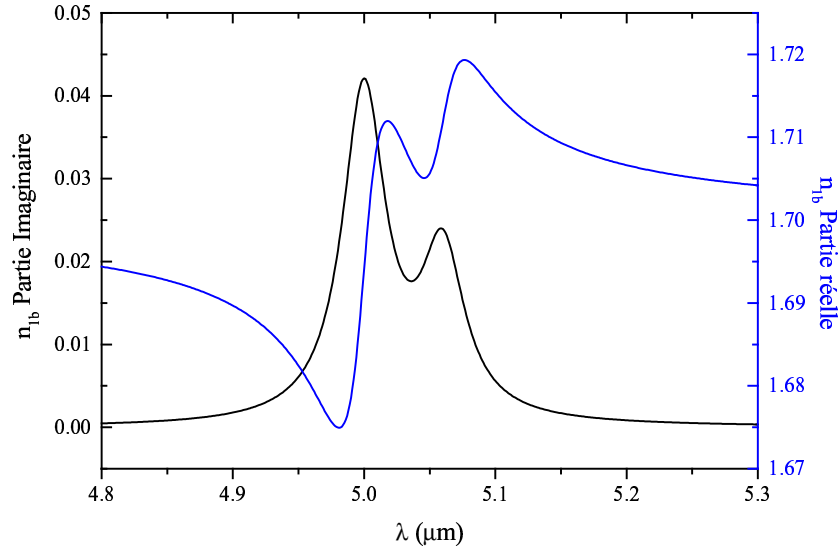


FIG. 6.2: Variation des parties réelle et imaginaire de l'objet absorbant, en fonction de la longueur d'onde

dans le chapitre 4, dont la partie rectangulaire possède un diamètre  $D = 4\mu m$ , le taper est d'angle  $\varphi = 30^\circ$  et l'apex de taille  $a_3 = 50nm$ .

### 6.3 Analyse du champ-proche optique : influence de l'épaisseur de l'échantillon

Avant de présenter les cartes spectroscopiques théoriques, nous allons étudier du point de vue champ proche optique l'effet de l'épaisseur de l'échantillon. Pour comprendre l'effet des bords de l'objet, on considère d'abord un objet absorbant avec une grande extension latérale de ( $s = 50\mu m$ ) comparée à la longueur d'onde  $\lambda_0 = 5\mu m$ . En effet, quand la taille de l'objet absorbant est petite par rapport à  $\lambda_0$ , les deux bords peuvent interagir et la figure de diffraction peut s'étendre sur une distance latérale plus importante que celle de l'objet ou être décalée par rapport à la position géométrique de l'objet. Nous avons représenté sur la Fig.6.3 la distribution de l'intensité de champ proche en fonction de la position latérale de la sonde (considérée ici comme un point matériel) et ceci pour trois échantillons d'épaisseurs différentes. Toutes ces intensités ont été calculées à une hauteur constante située à  $10nm$  au dessus de la surface de l'échantillon. Comme on peut le voir sur la Fig.6.3, l'intensité décroît au dessus de l'objet absorbant, mais la forme de la distribution de l'intensité n'épouse pas exactement la forme de l'objet. La distribution non

symétrique au dessus de l'échantillon est bien connue, elle est liée à la direction d'éclairage [de Fornel *et al.* 96]. D'autre part, les différentes oscillations obtenues sur la distribution de l'intensité sont liées aux interférences multiples entre les différentes ondes réfléchies sur les bords de l'objet encastré et l'onde incidente transmise. Nous pouvons aussi remarquer que l'amplitude des oscillations est faible par rapport au signal diffracté.

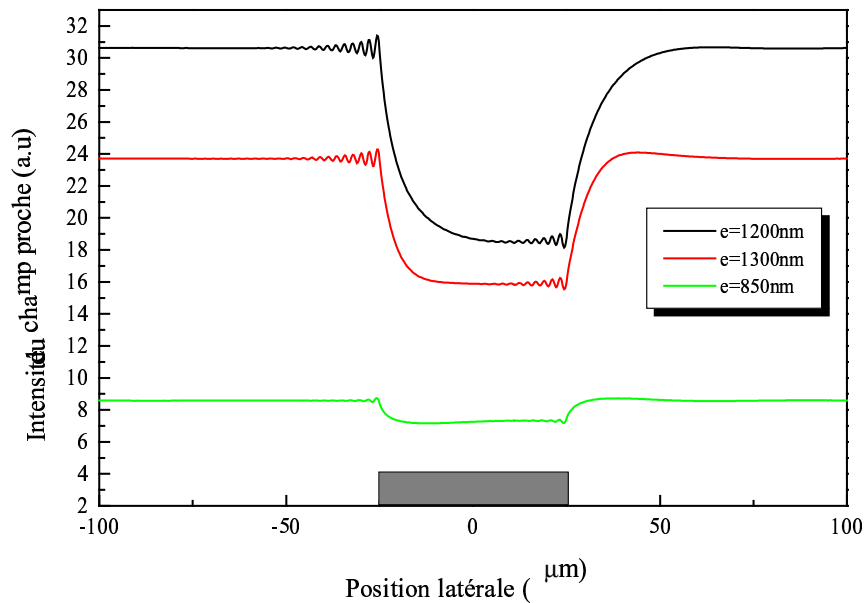


FIG. 6.3: Intensité du champ proche en fonction de la position latérale de la sonde par rapport à l'objet, pour différentes épaisseurs de l'objet absorbant.

Quand l'épaisseur de l'échantillon augmente, l'intensité en dehors de l'objet absorbant varie de manière non monotone. Ce comportement peut être expliqué simplement par le jeu des interférences multiples à l'intérieur de l'échantillon. En effet, si l'on fait abstraction de l'objet absorbant à l'intérieur de l'échantillon et que l'on représente l'intensité (associée aux ondes évanescentes) émise dans l'air (à  $10\text{nm}$  par exemple), on fait apparaître une courbe oscillante en fonction de l'épaisseur de l'échantillon (voir Fig.6.4). Ce comportement est identique à l'interféromètre de Fabry-Perot, sauf que l'onde transmise dans l'air est une somme infinie d'ondes évanescentes. Ce dernier point est associé au fait que la réflexion totale se situe à la dernière interface échantillon-air. Dans l'échantillon, on a une somme infinie d'ondes radiatives qui interfèrent entre elles: quand les interférences sont destructives, l'intensité correspond au maximum de la courbe de la Fig.6.4. Ce comportement explique les valeurs des intensités à l'extérieur de l'objet absorbant trouvées dans la Fig.6.3.



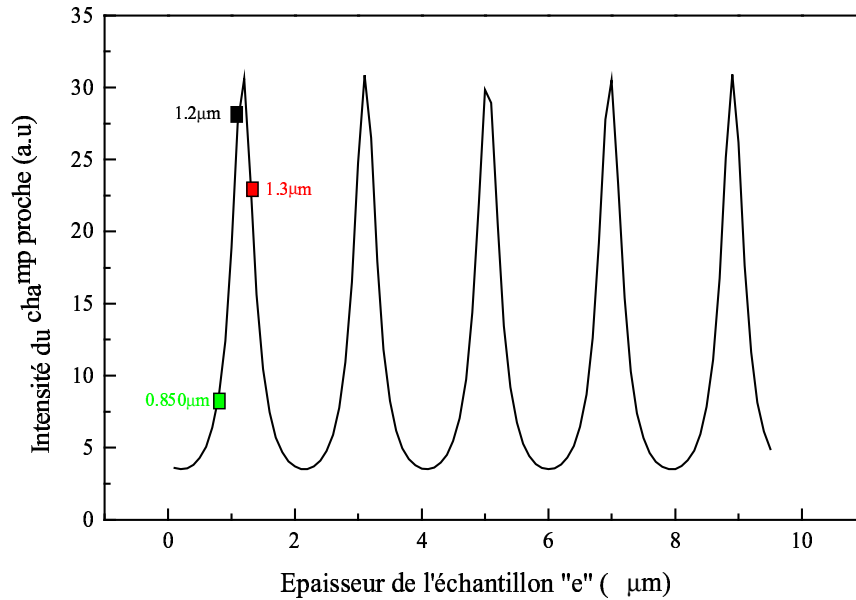


FIG. 6.4: Intensité du champ proche en fonction de l'épaisseur de l'objet absorbant. Les valeurs des épaisseurs de la Fig.6.3 sont précisées par des petits carrés.

## 6.4 Spectroscopie

Nous présentons maintenant les cartes spectroscopiques à deux dimensions donnant les lignes de balayage de la sonde en fonction de  $\lambda$ ,  $10nm$  au dessus de l'échantillon, afin de faire ressortir les bandes d'absorption. La coordonnée horizontale correspond à la position latérale du détecteur par rapport à l'échantillon, la coordonnée verticale correspond aux excursions en longueur d'onde utilisées lors de l'étude spectroscopique, les couleurs rendent compte de l'intensité détectée (plus la teinte est foncée, plus l'absorption est importante).

### 6.4.1 Spectroscopie sans la sonde

La Fig.6.5 représente une carte de spectroscopie pour un objet absorbant de  $5\mu m$  de large et  $1.2\mu m$  d'épaisseur placé au centre de l'image. On reconnaît sur cette figure les 2 zones correspondant au doublet dont le profil (selon  $y$ ) correspond à celui reporté Fig.6.2. Les minima d'absorption sont centrés sur les maxima de la partie imaginaire de l'indice de réfraction de l'objet absorbant. L'extension spatiale latérale (selon  $x$ ) au niveau de l'absorption est en accord satisfaisant avec la taille latérale de l'objet absorbant [Dazzi *et al.* 04]. Cette figure démontre qu'il est possible de détecter un objet absorbant avec sa signature spectroscopique. Nous avons présenté sur la Fig.6.5, avec une ligne verte, la position minimum du doublet (maximum d'absorption). On peut constater à partir de

cette carte, qu'il n'y pas de distortion dans les bandes d'absorption pour la taille latérale de l'échantillon considérée, contrairement à d'autres tailles considérées dans l'étude réalisé en polarisation P [Dazzi *et al.* 04].

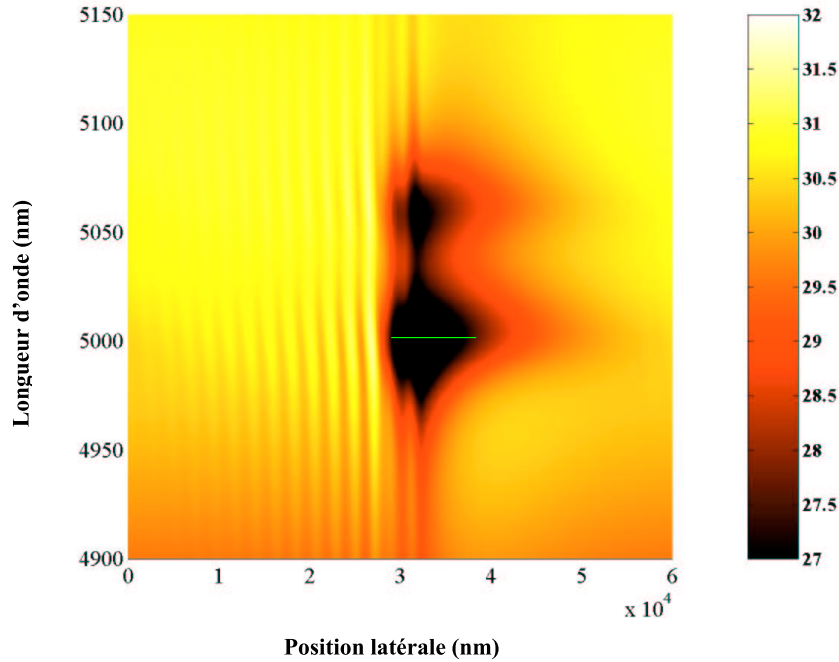


FIG. 6.5: Carte de spectroscopie de l'objet absorbant calculée à une distance de  $y_0 = 10nm$ , pour  $\lambda_0 = 5\mu m$  et  $\theta = 16^\circ$ , l'objet est  $1.2\mu m$  de long sur  $5\mu m$  de large.

Nous allons maintenant étudier l'effet de la distance sonde-échantillon sur les cartes spectroscopiques. Nous avons donc réalisé une carte de spectroscopie sur la Fig.6.6 comparable à celle de la Fig.6.5, pour différentes distances sonde-échantillon. Les différentes distances sonde-objet sont inférieures à  $\lambda_0$  pour que les composantes évanescentes restent prépondérantes par rapport aux composantes radiatives. Nous observons très rapidement (à partir de  $y_0 = 200nm$ ) que les bandes d'absorption se déforment fortement et disparaissent quasi complètement quand la distance d'observation est de l'ordre de la longueur d'onde ( $5\mu m$ ). Ceci s'explique par le fait que l'information (absorption) liée à l'objet de taille comparable à la longueur d'onde est portée principalement par les ondes évanescentes émises par l'objet. Au delà d'une certaine distance, celles-ci sont atténuées et l'information est peu portée, voire absente des ondes radiatives qui se propagent en champ lointain. Ceci montre aussi que les données spectroscopiques ne peuvent être obtenues sur un objet de taille comparable à la longueur d'onde que si l'on analyse l'information contenue dans

les ondes évanescentes diffractées par l'objet. Ceci rend nécessaire une détection en champ proche avec un détecteur placé à une distance de l'échantillon inférieure à  $\lambda_0/25$ .

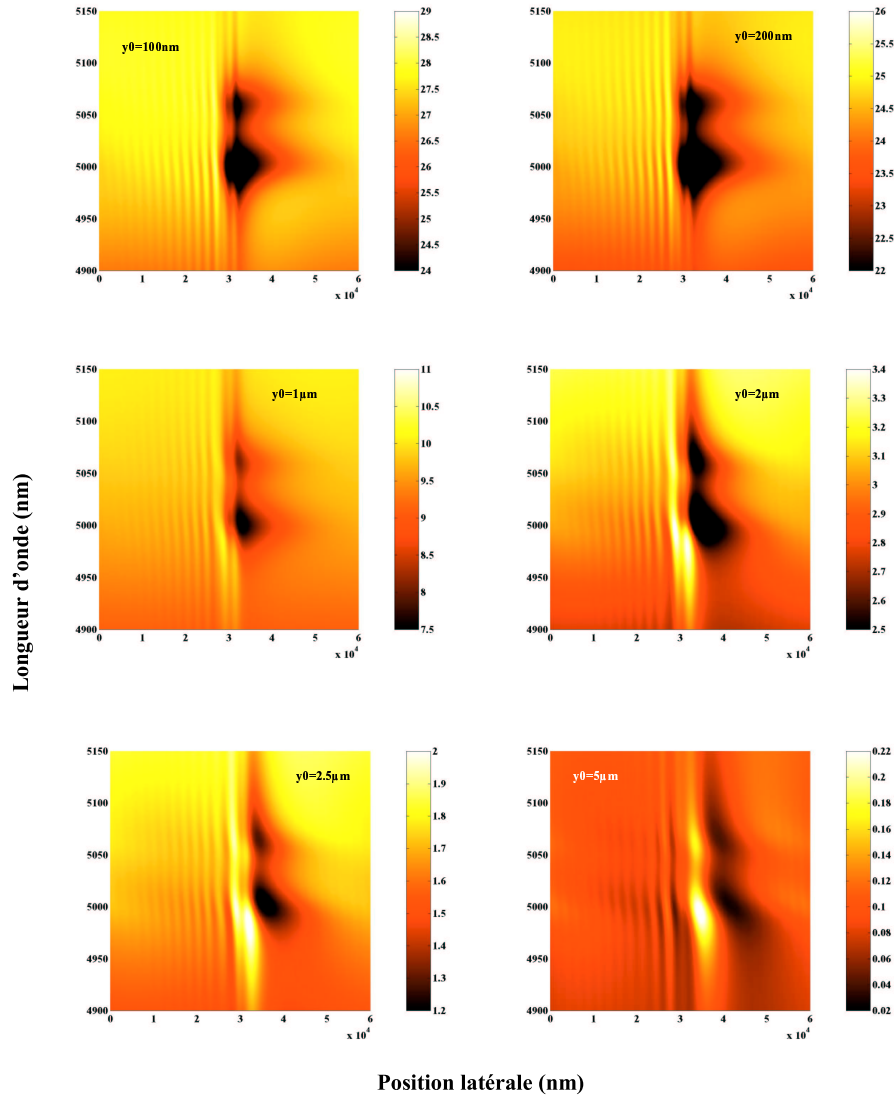


FIG. 6.6: Cartes de spectroscopie de l'objet absorbant calculées à différentes distances de l'échantillon  $y_0$ , pour  $\lambda_0 = 5 \mu\text{m}$  et  $\theta = 16^\circ$ . L'objet absorbant est de  $5 \mu\text{m}$  de large et  $1.2 \mu\text{m}$  d'épaisseur. La sonde n'est pas prise en compte.

### 6.4.2 Spectroscopie en présence de la sonde

Maintenant, nous présentons l'effet de la sonde dans la spectroscopie infrarouge, en considérant une sonde multimode de diamètre  $D = 4\mu m$  et de longueur  $a_1 = 9\mu m$  avec un apex de rayon  $a_3 = 50nm$  et un angle de taper  $\varphi = 30^\circ$ . La sonde est de chalcogénure d'indice de réfraction  $n_p = 2.4$  et possède quatre modes.

Avant de présenter la carte de spectroscopie du même objet que dans la section précédente (de largeur  $5\mu m$  et d'épaisseur  $1.2\mu m$ ) en tenant en compte de la présence de la sonde, nous présentons pour 4 longueurs d'ondes qui se situent en dehors et dans la zone du doublet d'absorption, le signal détecté sur une ligne. Sur la Fig.6.7a, on présente le flux transmis par la sonde quand elle se déplace à hauteur constante. Le flux est calculé avec les mêmes hypothèses que dans les chapitres précédents. Sur la Fig.6.7b, nous rappelons l'intensité du champ électrique sans la sonde, pour la comparaison. En effet, le but de ce calcul était de comparer la variation du flux transmis dans la sonde par rapport à l'intensité du champ électrique, pour savoir s'il était profitable de lancer le calcul de la carte spectroscopique. Cette étude nous a permis de prévoir un doublet même en présence de la sonde, bien que les intensités calculées ne soient pas du même ordre de grandeur, l'allure générale des courbes est peu affectée par la présence de la sonde.

En analysant la Fig6.7, et comme il a été déjà établi lors des calculs précédents (chapitre3-5), les courbes du flux transmis diffèrent des courbes de l'intensité du champ électrique. Mais différentes remarques peuvent être faites :

1-Dans les courbes de la Fig.6.7, l'intensité du champ électrique ainsi que le flux transmis dans la sonde décroît au-dessus de la l'objet absorbant, mais la forme de la distribution de l'intensité n'épouse pas exactement la forme l'objet.

2- La courbe du flux transmis n'est pas symétrique au dessus de l'échantillon, ce qui est lié à la direction d'éclairage comme dans le calcul sans sonde.

3- Les différentes oscillations obtenues sur la distribution de l'intensité, qui sont liées aux interférences multiples entre les différentes ondes créées par la présence de l'objet encastré et l'onde incidente transmise, apparaissent sur les Fig.6.7a et Fig.6.7b.

4-Bien que l'intensité du champ soit différente du flux transmis il semble à partir de ces courbes, que la présence de la sonde, n'affecte pas d'une manière importante la spectroscopie car les sens de variation sont toujours identiques dans les Fig.6.7a et Fig.6.7b.

Pour voir l'effet de la sonde dans la spectroscopie, nous avons calculé le flux transmis dans la sonde de chalcogénure, pour les différentes longueurs d'onde du domaine spectral :  $[4.8 - 5.08] (\mu m)$ , où le doublet est localisé et le résultat est présenté sur la Fig.6.8. Il sera comparé avec la carte de spectroscopie réalisée dans le cas sonde sans objet sur la Fig6.5, pour la même distance  $y_0 = 10nm$ .

Quand on observe attentivement les deux cartes de spectroscopie (Fig.6.5 et Fig.6.8), on remarque que le doublet apparaît toujours dans la même gamme spectrale, mais il

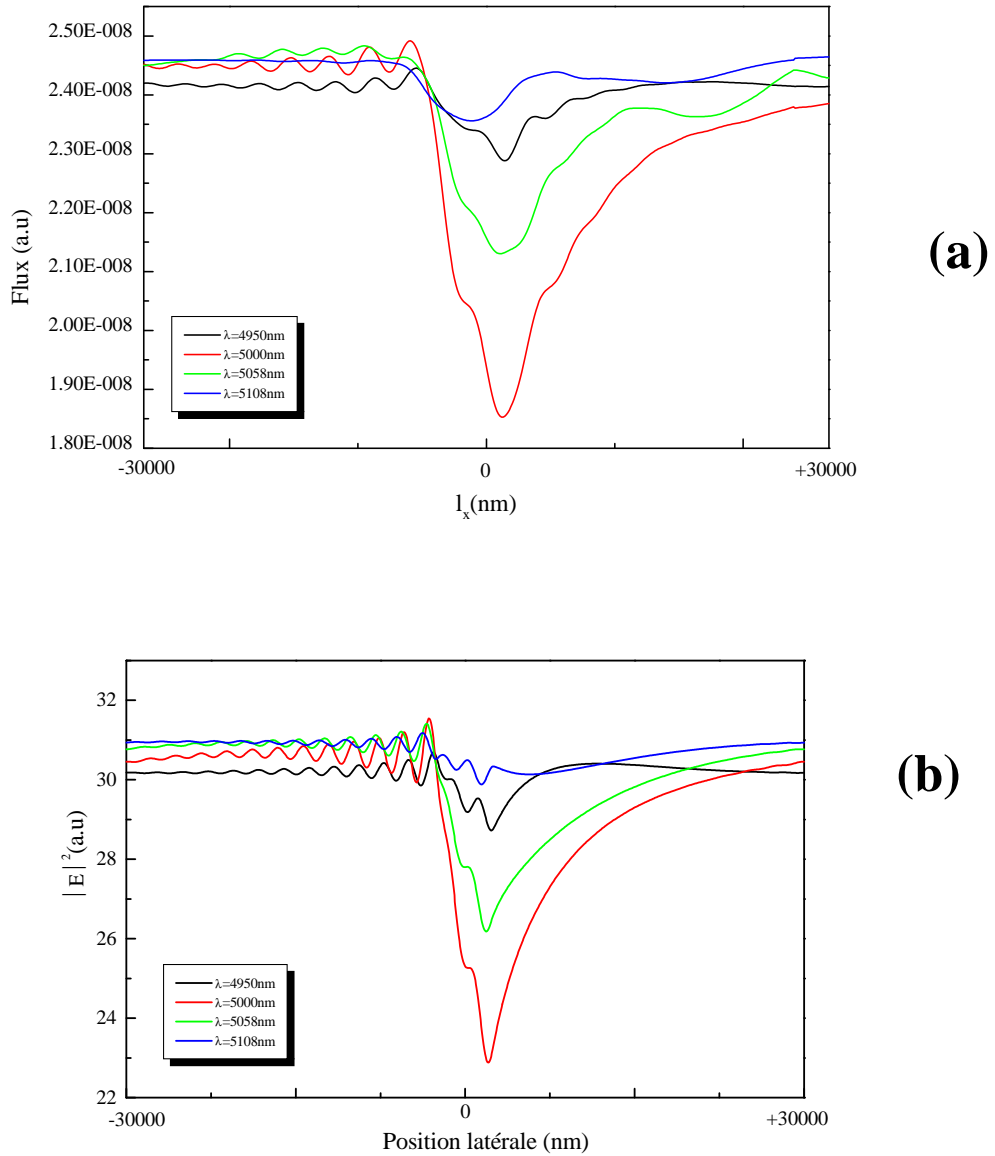


FIG. 6.7: (a) Flux transmis dans la sonde. (b) Distribution de l'intensité du champ électrique en l'absence de la sonde.  $\lambda_0 = 5\mu\text{m}$  et  $\theta = 16^\circ$ , l'objet absorbant est de dimension de  $5\mu\text{m}$  de large et de  $1.2\mu\text{m}$  d'épaisseur.

est légèrement modifié quand la sonde est prise en considération dans les calculs. La perturbation de la sonde se traduit par une légère distorsion des bandes d'absorption. Ceci semble être en bon accord avec les travaux expérimentaux réalisés par Piednoir

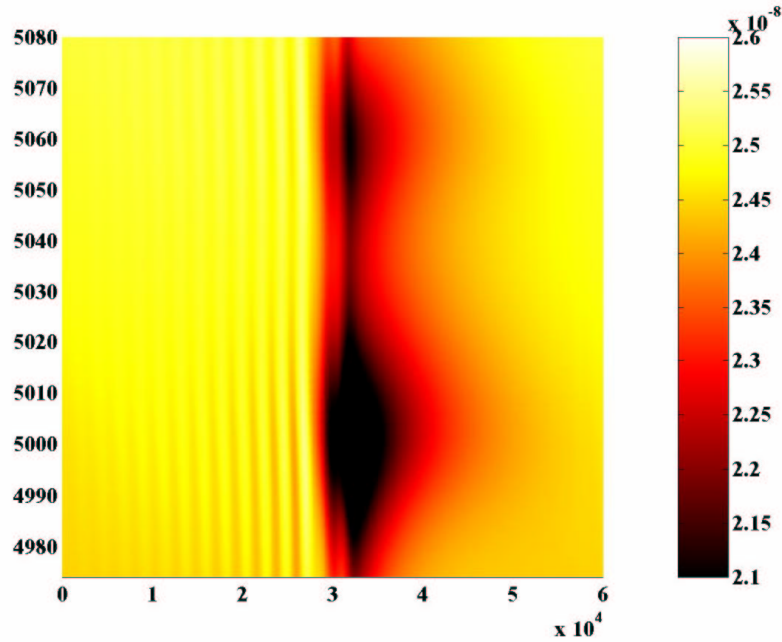


FIG. 6.8: Carte de spectroscopie de l'objet absorbant calculée en tenant compte de la présence de la sonde à une distances  $y_0 = 10nm$ , pour  $\lambda_0 = 5\mu m$  et  $\theta = 16^\circ$ , l'objet absorbant est de  $5\mu m$  de large et  $1.2\mu m$  d'épaisseur. La sonde de chalcogénure est de diamètre  $D = 4\mu m$ , d'angle  $\varphi = 30^\circ$  et rayon d'apex  $a_3 = 50nm$ , son indice de réfraction est  $n_{1p} = 2.4$ .

[Piednoir *et al.* 95], qui a montré que la détection du doublet dépend fortement de la nature des sondes. Dans ces travaux, Piednoir a montré que la résolution des microscopes de champ proche en infrarouge, dépendait aussi de la la taille de la sonde, de sa forme et bien évidemment des paramètres opto-géométriques [Piednoir *et al.* 96], ce qui rejoint les conclusions relatives à la fonction de transfert présentées dans le chapitre 3.

Enfin, des travaux expérimentaux récents[Schaafsma *et al.* 99], se sont focalisés dans le développement des microscopes en infra-rouge, avec des sondes monomodes et multimodes de chalcogénure [Talley *et al.* 00]. Ces travaux ont montré la reproductibilité des résultats en utilisant des sondes chalcogénure pour des travaux de spectroscopie sur différents échantillons, y compris des cellules biologiques avec des résolutions s'approchant de  $\lambda/25$ .

## 6.5 Conclusion

Cette étude montre qu'il est possible de détecter par une technique champ proche optique la présence d'un objet absorbant dont la signature optique est caractérisée par un doublet d'absorption dans le domaine infra-rouge. Nos calculs confirment ce qui a été observé expérimentalement dans le domaine infrarouge. Dans le cas d'objets absorbants dont la taille latérale est supra-longueur d'onde, la localisation et la taille latérale de l'objet ainsi que la position des bandes d'absorption sont respectées. Cependant, la détection doit s'effectuer en champ proche, très près de l'échantillon, pour obtenir ce résultat. Dans le cas d'un objet dont la taille latérale est sub-longueur d'onde, la localisation s'effectue aussi mais au prix d'un élargissement latéral (effet de diffraction des bords). Dans ce cas les bandes d'absorption sont détectées avec moins de distorsion.

L'introduction de la sonde n'affecte pas l'apparition du phénomène du doublet, bien que la carte de spectroscopie réalisée en présence de la sonde présente le flux transmis dans la sonde dans la gamme de longueurs d'onde du domaine de l'infrarouge. Nous avons vérifié que le doublet reste toujours localisé en  $\lambda$ , mais il subit une légère déformation, due à la présence de la sonde. Ceci reste en bon accord avec ce qui a été montré dans le visible, au cours des chapitres 2-5, où nous avons montré que le calcul du flux transmis dans la sonde tient compte de trois différentes contributions, liées au système sonde-objet (signal collecté), essentiellement la diffusion de l'objet et la perturbation de la sonde quand elle est latéralement loin et dans le champ proche de l'objet.

A travers l'application présentée dans ce chapitre, nous établissons la validité du modèle théorique développé au cours de cette thèse pour toute étude impliquant un couplage sonde-objet en prenant en compte la globalité des phénomènes de diffraction liés à cette configuration.

# Conclusion Générale

L'objectif fixé à ce travail était de mettre en place un outil nouveau pour effectuer des simulations capable de prendre en compte les effets liés à la présence de la sonde dans la formation des images de champ proche optique. Pour atteindre ce but, sous la direction de L. Salomon nous avons mis en place, en prolongement de la méthode différentielle, un nouveau code numérique intégrant les algorithmes matriciels T et S. Ce qui nous autorise, moyennant les précautions numériques évoquées dans le chapitre 2, à prendre en compte des zones modulées étendues. Nous avons mis à profit cette possibilité pour modéliser des sondes de tailles réalistes se déplaçant au-dessus d'un objet diélectrique en mode à hauteur constante. Après les vérifications nécessaires pour nous assurer de la fiabilité numérique des calculs, nous avons montré les possibilités offertes par ce modèle global en nous limitant au cas de la polarisation S.

Dans les fibres monomodes comme dans les fibres multimodes, nous avons montré qu'il était possible de décrire rigoureusement le couplage entre le champ électromagnétique en chaque point de la ligne de balayage en présence de la sonde et l'intensité transmise par le (ou les ) mode (s) guidé (s) dans les sondes. Nous avons aussi montré l'influence de la forme de l'extrémité de la sonde, des contrastes d'indice entre échantillon et sonde sur le signal détecté. Ceci nous a conduit à nous poser d'une façon renouvelée le problème de la fonction de transfert du PSTM et de l'éventuelle passivité de la sonde. Le travail entrepris dans le cas des sondes monomodes nous entraîne à nuancer les conclusions antérieures et dire que la définition d'une fonction de transfert n'est pas possible en général et que seule une pseudo-fonction de transfert semble être accessible. Cette approche doit être poursuivie et étendue au cas des sondes multimodes où des premiers résultats numériques délicats à interpréter, laissent cependant supposer que de telles sondes sont plutôt actives que passives. L'étude en polarisation P reste aussi à effectuer.

Enfin nous avons pu prolonger ce travail de modélisation dans deux directions où nous nous sommes livrés à des comparaisons qualitatives avec des résultats expérimentaux. La première direction est celle de la prise en compte d'une structure "réelle" de la sonde : coeur, gaine et éventuellement métallisation et différenciation des techniques de fabrication. Nos travaux confirment les observations expérimentales : le métal absorbant limite les interactions sonde-objet et donne un meilleur contraste que les sondes purement



diélectriques. Là encore notre modèle pourra être étendu vers la prise en compte de l'excitation des plasmons dans le revêtement métallique en vue d'exalter le signal transmis. La seconde direction explorée est celle de l'absorption dans le domaine infra-rouge. Nous avons montré la pertinence de notre modèle pour étudier la spectroscopie d'un doublet d'absorption dans des circonstances variées. Le prolongement serait ici de pouvoir se tourner vers des molécules biologiques dont "la signature en absorption" est souvent située dans le domaine IR.

Il ressort de ce travail que le modèle mis en place permettra d'approcher la réalité des conditions expérimentales. Les améliorations numériques (parallélisation des codes, augmentation de la puissance de calcul, les évolutions techniques des langages) que nous commençons à adapter, réduisent les temps de calculs et permettent d'envisager un passage en 3D, nous affranchissant ainsi les contraintes liées à la périodicité de l'actuel modèle 2D.

# *Annexe A*



# Theoretical study of an absorbing sample in infrared near-field spectromicroscopy

A. Dazzi<sup>a,\*</sup>, S. Goumri-Said<sup>b</sup>, L. Salomon<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique, Centre Universitaire Paris-sud, Bâtiment 209D BP 34, 91898 ORSAY Cedex, France*

<sup>b</sup> *Laboratoire de Physique (LPUB), CNRS UMR 5027, Université de BOURGOGNE, Faculté des Sciences Mirande, 9 Avenue Alain Savary, BP 47 870, 21078 Dijon Cedex, France*

Received 19 September 2003; received in revised form 24 February 2004; accepted 27 February 2004

## Abstract

This paper is devoted to study the near-field spectrometry in the infrared spectral range. To understand the behavior of the infrared light diffracted by an object, numerical calculations have been carried out with Fourier Modale (FM) method within R-matrix algorithm. We consider the case of three-dimensional system including a translational symmetry in one direction, where is included an homogenous layer in which is buried an absorbing object. Using an optical near-field analysis and by calculating the electric field intensity distribution, both of the thickness effect and the lateral size of the absorbing sample are investigated. It is found that the distribution of the intensity related to the electric field is depending on geometry of the absorbing object. Also, we show how the diffraction due to the sample edges has an effect on the field intensity distribution. After that we pay more attention to the spectroscopy mapping description, in particular to the influence of the sample characteristics on detection of an absorbent object in near-field. This technique is also able to detect the doublet of an absorbent object with over-wavelength size but in near-field zone. When the lateral size of the object is a sub-wavelength, the absorption bands are detected with slight distortion but the diffraction effects are present. To diminish the diffraction effects, we reduce the sample thickness which may induce a more important absorption bands distortion.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

*PACS:* 42.25.Bs; 42.25.Gy; 68.37.Uv; 68.49.Uv; 61.14.Dc; 42.25.Fx

*Keywords:* Optical near-field; Spectromicroscopy; Diffraction effects

## 1. Introduction

Infrared spectroscopy is a powerful technique for identifying molecules and mid-infrared domain is often used as a molecular fingerprint region. *Chemical mapping* or spectromicroscopy is

\* Corresponding author. Tel.: +33-1-64-46-81-23; fax: +33-1-64-46-41-48.

E-mail address: [alexandre.dazzi@lure.u-psud.fr](mailto:alexandre.dazzi@lure.u-psud.fr) (A. Dazzi).

currently performed at synchrotron radiation centers where the brilliance of the beam allows to reach a spatial resolution close to the diffraction limit ( $\cong \lambda$ ) [1–3]. However, in the infrared domain the diffraction limit exceeds largely the size of many interesting species such as a typical living cell (5–30  $\mu\text{m}$ ). Furthermore, much interest has been devoted to enhance this resolution in magnitude by using near-field microscopy. In fact, during the last decade these new techniques have been developed and refined, principally in the visible region and few works were devoted to mid-infrared domain [4–8]. This is mainly due to the limitation of the number of tunable sources. Actually, free electron lasers and optical parametric oscillators can cover this interesting spectral range. This is why we have developed an infrared microscope working in the photon scanning tunneling microscope (PSTM) configuration. Using this optical near-field technique, our first experimental results show that it is possible to visualize easily a doublet of an absorbent substance centered at 3  $\mu\text{m}$  [9]. To go further, we have undertaken to model numerically this device to understand theoretically the behavior of the diffracted field by an absorbing sample when sweeping the wavelength across absorption bands.

This paper is organized as follows. In Section 2, we describe the physical system, illumination conditions as well as the sample. Also we give brief

details of the numerical technique used in the computation of diffracted electromagnetic field. In Section 3, both of effects of the sample thickness and its lateral size in the diffracted electromagnetic field are studied. This step is important because it allows us to determine the main system parameters related to the sample spectroscopy. In Section 4, we detail the theoretical spectroscopy maps obtained for an absorbent sample buried in homogenous layer. The effect of different geometrical parameters of the sample are studied in detail to point out their influence on the spectral detection and spatial localization of the absorbent sample. A general conclusion is given in Section 5, which allows us to make an evaluation of our results and to draw up future perspectives with the optical near-field technique.

## 2. Description of the physical system and model

In this paper, we consider a PSTM configuration as an optical near-field technique. The physical system consists to illuminate in total reflection with plane wave, a sample deposited on prism. The electromagnetic field diffracted by the prism–sample system is collected close to the sample by a tapered probe. In Fig. 1, we consider a sample which incorporates: an homogenous film of refractive index  $n_{1a} = 1.7$  including an absorbent

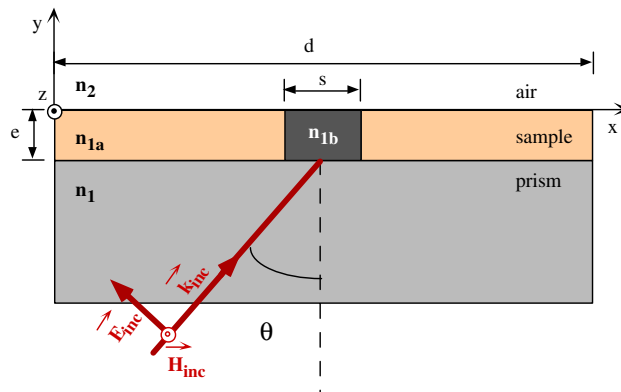


Fig. 1. Schematic description of the set-up:  $n_1 = 4$  is the refractive index of the prism,  $n_{1a} = 1.7$  is the refractive index of the thin film,  $n_{1b}$  is the refractive index of the absorbing object,  $n_2 = 1$  the refractive index of air.  $d$  is the period of the structure,  $s$  is the size of the absorbing region,  $e$  the thickness and  $\theta$  is the angle of incidence.

object, infinite in the  $z$  direction and possesses a rectangular section of lateral size taken equal to  $s$  and  $e$  as the thickness. The refractive index of the object is equal to  $n_{1b}$ , for which the real and imaginary parts are presented in Fig. 2. This latter is similar to the refractive index of the photosensitive polymer diazonaphthoquinone usually used in photolithography. Moreover, for the considered object, we see in Fig. 2 that the refractive index shows one characteristic doublet around  $5 \mu\text{m}$  which allows us to identify its presence without encountering any problem. Incidence angle and different refractive indices of prism–sample–air are taken in such manner that a total reflection can appear in sample–air interface. The detection of electric field is performed in the constant height scanning mode, at  $y_0$  height less than  $\lambda_0$ . The prism, in Germanium, is modeled by semi-infinite medium of refractive index  $n_1 = 4$  (for  $\lambda_0 = 5 \mu\text{m}$ ) in the considered wavelength domain. One must notice here that different effects of opto-geometrical parameters (e.g., size of the absorbent sample, refractive index, illumination conditions, etc.) can be studied in detail easily with this model.

The numerical work is performed by the FM method improved by R-matrix algorithm. This method is well known by the authors working in the diffraction gratings field [10]. It consists to write the magnetic field (for TM polarization) with Rayleigh expansion in two homogenous zones (prism and air). The zone of the sample is inhomogeneous (i.e., its refractive index varies along  $x$  direction) and is called also modulated zone (see

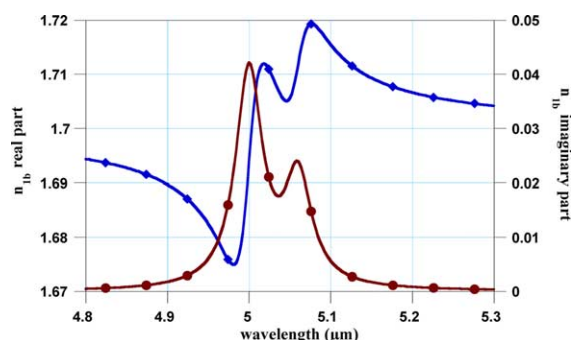


Fig. 2. Distribution of the real ( $\blacklozenge$ ) and imaginary ( $\bullet$ ) part of the refractive index  $n_{1b}$  versus the wavelength.

Fig. 1). We suppose that a finite number of modes in Rayleigh expansion is sufficient to describe the electromagnetic field outside the inhomogeneous structure. To determine the transmission and reflection matrices of the system composed by three zones defined previously, we choose  $N$  independent vectors. After that, we calculate their images through the inhomogeneous structure with a numerical method (Runge–Kutta). By writing the boundary conditions of the electromagnetic field for different interfaces, we obtain the cited above matrices. Once these matrices are determined and using the incident wave, it is possible to calculate the electromagnetic field in three zones. One of the most important advantage of this method is the possibility to evaluate the contribution of both radiative and evanescent components emitted by the diffracted zone. The details of FM method have been reported elsewhere [11]. This method is more adapted for periodical structure. But it is possible to adapt the period to the used wavelength to guarantee that there is no (or at least minimized) electromagnetic coupling between the absorbent objects. For the range of absorbent object geometries considered in this work, the period is taken equal to  $200 \mu\text{m}$ .

Unfortunately, when the modulated zone becomes higher in height (i.e., in the order of the wavelength) or/and the truncation number  $N$  increases, the method becomes unstable. This instability is related to the numerical problem encountered when the evanescent orders are propagated during the Runge–Kutta integration. Moreover, for any precision obtained by the computer, the rapid decreasing of evanescent orders of low range strongly induces numerical instabilities. To find a remedy for this problem, different roughly equivalent algorithms may be used. In this work, we employ the R-matrix algorithm to circumvent all numerical instabilities [12,13].

However, at this level the problem is not completely resolved mainly in TM polarization. In fact, other numerical instabilities may arise when treating metals with a high reflectivity power. It has been reported by Li [14] that when using the standard theorems of Fourier factorization of the truncated Fourier series of products of

discontinuous functions employed in the differential theory are not converging everywhere in TM polarization. So a new formulation based on a correct representation of truncated Fourier series of products of discontinuous functions was proposed [15]. The convergence rate with respect to the number of diffraction orders is much faster and may approach the convergence rate in TE polarization.

We must notice that when modeling this system, we have not taken into account the presence of the probe. We suppose that the tip probe collect the intensity linked to the different electric field components without modifying the electromagnetic field diffracted by the object [16,17].

### 3. Optical near-field analysis

#### 3.1. Sample thickness influence

To understand the influence of the absorbing edge effect (absorbing object is bounded by two edges), we start our study by analyzing the sample for which the absorbent object has a large lateral extension ( $s = 50 \mu\text{m}$ ) compared to the used wavelength ( $\lambda_0 = 5 \mu\text{m}$ ). While when the absorbent zone is very small compared to  $\lambda_0$ , the two edges may interact and the distribution intensity related to the object may be extended to a large distance more greater than the object lateral surface. It may also be shifted with regard to the geometrical position of the object. Below, we examine this sight more carefully. These effects are well known for the near-field community for the sample including non-absorbent surface defects and sub-surface particle [18,19]. It seems very important to describe these sights for the absorbent objects in aims to achieve the spectroscopic study in part IV.

We represent in Fig. 3, the electric field intensity distribution versus the lateral position of the probe for three different sample thicknesses. All the intensities are calculated in constant height scanning mode, at  $y_0 = 10 \text{ nm}$  above the sample surface. It is shown in Fig. 3 that the intensity decreases above the absorbent zone of the object, but the distribution intensity does not take the exact shape

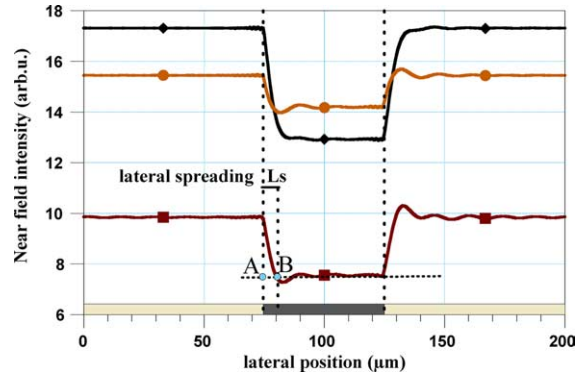


Fig. 3. Near-field intensity distribution at  $\lambda = 5 \mu\text{m}$ ,  $\theta = 20^\circ$  and  $y_0 = 10 \text{ nm}$  versus the lateral position for different thicknesses sample: (a) (●)  $e = 0.5 \mu\text{m}$ , (b) (◆)  $e = 1.3 \mu\text{m}$ , (c) (■)  $e = 2 \mu\text{m}$ .

of the object. The asymmetrical distribution above the sample is due to illumination direction [20]. Consequently, the different oscillation patterns obtained on the intensity distribution are due to the interference between waves created by the presence of the object and the transmitted incident wave. Also, we may observe that the amplitude of these oscillations is weak compared with the detected signal. This phenomenon is associated to the fact that both of real parts of refractive index of the absorbent object and thin film are equal. Furthermore, the imaginary part of refractive index of the absorbent object contributes to the damping down of the oscillations.

We must point out that when the sample thickness increases, the intensity outside the absorbent zone varies in non monotonous manner. This behavior may be explained by the interference which takes place inside the sample layer. In fact, if we consider the homogenous sample with a refractive index  $n_{1a} = 1.7$  (without the absorbent object), and one represents the intensity (associated to the evanescent components) emitted in air zone (for example at  $10 \text{ nm}$ ), we obtain an oscillating curve versus the sample thickness (see curve (a) in Fig. 4). This behavior is identical to a Fabry–Perot interferometer, except that the transmitted wave in the air medium is an infinite sum of evanescent waves. This last point is related to the fact that the total reflection takes place on the last

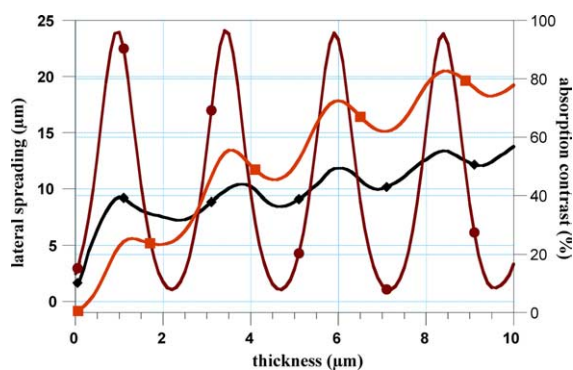


Fig. 4. Representation of: (a) (●) Near-field intensity versus the sample thickness (the scale is not represented here and the amplitude of the curve has been adapted to appear in full scale). (b) (■) Value of absorption contrast versus the sample thickness. (c) (◆) Lateral spreading versus the sample thickness.

sample–air interface. In the sample layer, we have an infinite sum of radiative waves which are interfering between them: when these interferences are destructive, the intensity corresponds to a maximum of the curve (a) and when they are constructive, there is a confinement of the electromagnetic field inside the sample and we observe a minimum in curve (a). This behavior may explain all values of the intensities (outside the absorbent zone) found in Fig. 3.

Now, we define two important quantities which allow us to explain the next results: the absorption contrast which will enable us to define the spectroscopic threshold of detection for any object of a given nature. The lateral spreading will allow us to discuss the side positioning and the perception of the absorbent object size on a spectroscopic image.

Firstly, the absorption contrast is defined by  $(I_{\max} - I_{\min}) / (I_{\max})$ , where  $I_{\max}$  defines the average value of the near-field intensity outside the absorbent zone.  $I_{\min}$  can be obtained by taking the average value of the near-field intensity about this zone (as is shown in curve (a) of Fig. 3). Secondly, the lateral spreading (Ls) represents the lateral distance between two points A and B. Where A is the intersection of the vertical line in right-hand side passing by the left end of the absorbing object and the horizontal line defined by  $I_{\min}$ , and B is the intersection of the curve of intensity with the  $I_{\min}$  line. We present in Fig. 4 the absorption contrast

(curve (b)) and the lateral spreading (curve (c)) versus the sample thickness (by including the object). These different curves are displayed for the used wavelength ( $\lambda_0 = 5 \mu\text{m}$ ). We observe the same behavior for the other wavelengths (not represented here). We may observe from Fig. 4 that these two quantities increase when the sample thickness increases. They exhibit also oscillations pattern with maximum and minimum in phase with the diffracted intensity (curve (a) in Fig. 4). This will have a direct consequence on the spectroscopy. One can verify here that the absorption contrast diminishes to tend to zero when the thickness vanishes. However, if we consider that we can detect an absorption contrast at least lower than 5%, the sample thickness must be great than or equal to  $0.35 \mu\text{m}$  ( $\cong \lambda_0/15$ ). This value corresponds to a lateral spreading of  $5 \mu\text{m}$  (i.e.,  $\lambda_0$ ). All these considerations will have important consequences on spectroscopy mapping which will be shown in the following section.

### 3.2. Effect of the lateral size of the sample

We present in Fig. 5 the intensity distribution as function of the lateral position above the sample and for different lateral size of object. The thickness is fixed at  $1 \mu\text{m}$  and the wavelength is conserved equal to  $5 \mu\text{m}$  with the refractive index of absorbent object taken equal as previously to  $n = 1.7 + j 0.04$ . For a lateral size of the absorbent

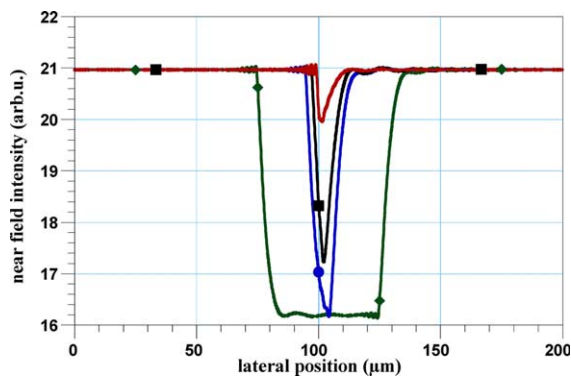


Fig. 5. Near-field intensity distribution at  $\lambda = 5 \mu\text{m}$ ,  $\theta = 20^\circ$  and  $y_0 = 10 \text{ nm}$  for different size of absorbing region: (a) (◆)  $s = 50 \mu\text{m}$ , (b) (●)  $s = 10 \mu\text{m}$ , (c) (■)  $s = 5 \mu\text{m}$ , (d) (–)  $s = 1 \mu\text{m}$ .

object greater than or equal to the lateral spreading (see Fig. 5(a)), the contrast absorption is constant and it is found equal to 23%. Moreover, when the size of the absorbent object is less than the lateral spreading (see Fig. 5(b)–(d)) the intensity above the absorbent object decreases slightly and consequently the absorption is more weak. If we suppose that we can detect an absorption contrast equal at least to 5%, an absorbent object for which the lateral size is greater than or equal to  $1\ \mu\text{m}$  can be detected to the detriment of the lateral spreading. Then, for a sample thickness equal to  $0.1\ \mu\text{m}$  (not represented here), we obtain the same behavior as for a thicker object. But in this case the absorption contrast is weak (about 1%) when the object lateral size is greater than or equal to  $1\ \mu\text{m}$  (with a lateral spreading equal to  $2\ \mu\text{m}$ ). Under this object lateral size the contrast becomes weaker and the lateral spreading is conserved.

However, the quantities discussed here (absorption contrast and the lateral spreading) are related to the opto-geometrical parameters of the sample, the substrate and superstrate, as well as in illumination conditions of the system. So, the absorption contrast and the lateral spreading found are specific for the considered opto-geometrical parameters. Moreover, these quantities allow us to better apprehend the limitations which may occur when the spectroscopy images are recorded in both cases, theoretical and experimental. From all these results, we see that the absorption contrast plays an important role in the detected intensity. Consequently, in experimental studies, the quality of tunables sources as well as the system noise (mechanical and electronic) will have a great importance to define the threshold of minimal detection for the absorbent object.

## 4. Spectroscopy

### 4.1. Spectroscopy mapping description

In this study, we choose to draw the spectroscopy map at two dimensional with the aim to extract the absorption bands when possible. On the different figures (from Fig. 6 to Fig. 9), the horizontal coordinate corresponds to a lateral position

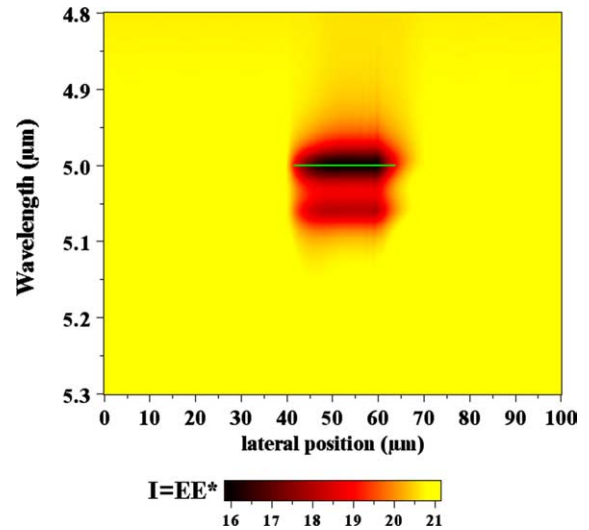


Fig. 6. Linear mapping of an absorbing region calculated at  $y_0 = 10\ \text{nm}$ ,  $\lambda = 5\ \mu\text{m}$  and  $\theta = 20^\circ$  from the surface of the thin film. Absorbing object parameters are  $s = 20\ \mu\text{m}$ ,  $e = 1\ \mu\text{m}$ . The colour bar describes the variation of the electric field intensity.

of the detector from the object. The vertical coordinate corresponds to the wavelengths scanned around the position of the doublet. In the intersection point, the color corresponds to the value of the intensity detected by the probe (positioned here at  $10\ \text{nm}$  above the sample).

In Fig. 6, we describe the spectroscopy map of absorbent zone of  $20\ \mu\text{m}$  in width and  $1\ \mu\text{m}$  in thickness. Also, we identify two zones corresponding to the doublet for which the profile (parallel to  $x$  axis) is comparable to that reported in Fig. 3 and Fig. 5. The minima of absorption (vertically to  $x$ -direction) are centred on the maxima of the imaginary part of refractive index of the absorbent object (see Fig. 2). We find that the stronger the imaginary part of refractive index of the object is, the more absorption is, and the weaker detected intensity is. The position of the absorbent zone (related to the doublet) in Fig. 6 reproduces the lateral size of the absorbent object with a lateral spreading (as observed in Fig. 3, Fig. 5 and remarks given in Section 3.2). This figure shows that it is possible to detect the absorbing object by its spectroscopic



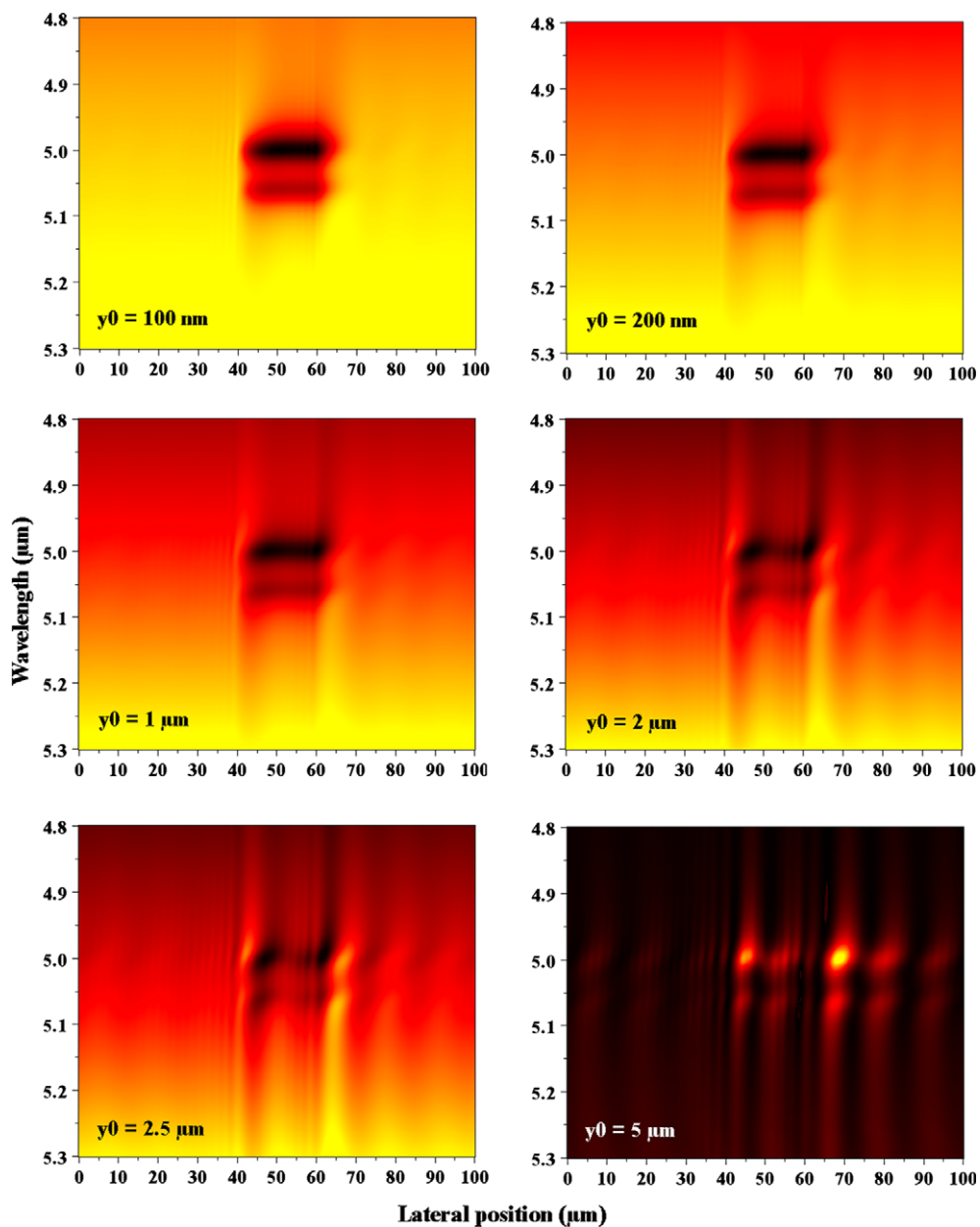


Fig. 7. Behaviour of the linear mapping versus the tip-sample distance.

signature. We have presented (with green lines in Fig. 6) the position of the minima of the doublet. We may see that there is no distortion on the absorption bands for the considered lateral size of sample.

#### 4.2. Sample-probe distance influence

In optical near-field, it is well known that the distance between the probe and sample is an important parameter, and this may have a strong

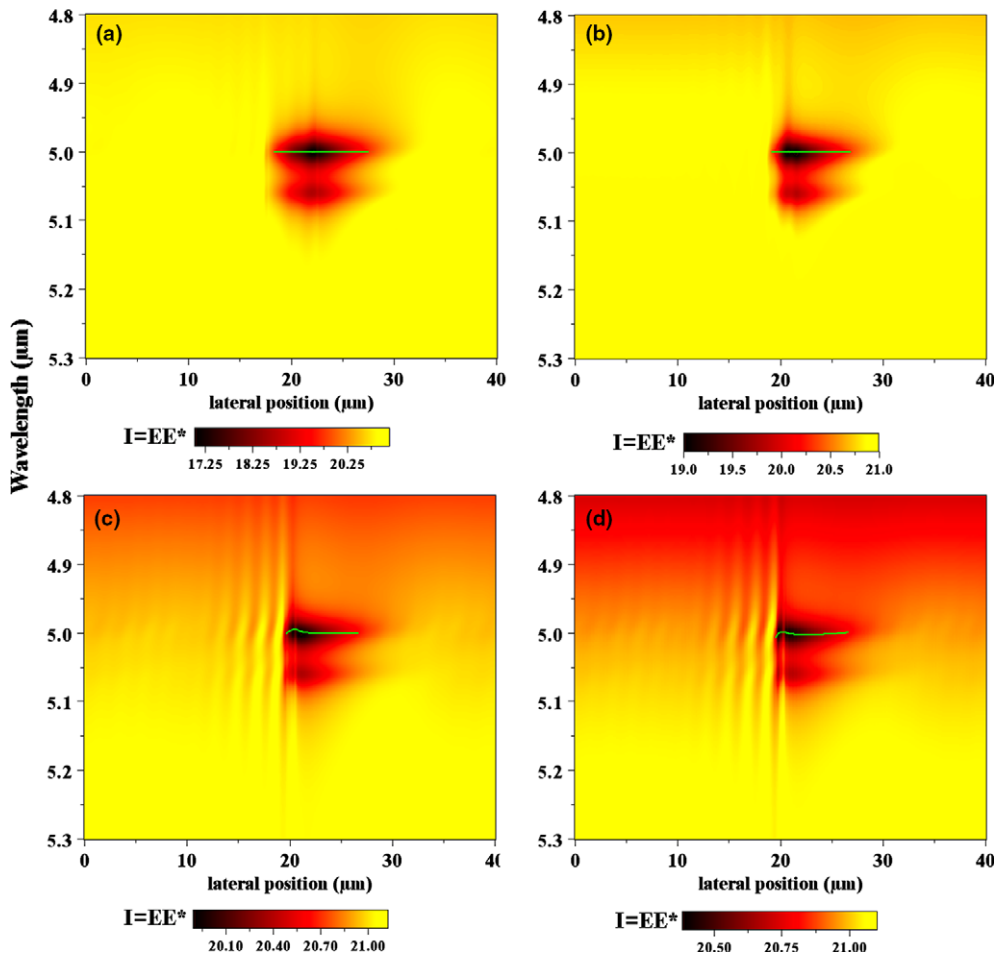


Fig. 8. Shift and distortion of the absorption bands versus the lateral size of the sample (thickness is  $1 \mu\text{m}$ ). Sample size is: (a)  $5 \mu\text{m}$ , (b)  $2 \mu\text{m}$ , (c)  $1 \mu\text{m}$ , (d)  $0.5 \mu\text{m}$ .

influence on the detected intensity as well as the electromagnetic field distribution [20,21]. We have performed a spectroscopy map comparable to that of Fig. 6 and for different probe–sample distances. The different detection lines are positioned in the zone  $(0, \lambda_0)$ , where generally the evanescent components are strong in amplitude compared to the radiative components. This result is reported in Fig. 7, where we observe that the absorption bands are weakly modified from 10 to 200 nm and they are progressively deformed from 200 nm to reach  $\lambda_0$ .

One can observe here that the needed information, detection of the two absorption bands and the lateral position of the absorbent object, is all

the more precise as the distance from observation compared to the sample is weak. This is why, one of the optimal operating conditions is to position the probe of detection in the near-field zone, at a distance ranging between 0 and  $\lambda_0/25$ . Because the illumination has been carried out in total reflection, and the dielectric contrast between the absorbent object and the sample is weak, the intensity associated to the radiative orders is relatively weak, about  $3.0 \times 10^{-3}$  (see Fig. 6 for  $y_0 = 5 \mu\text{m}$  (black color) to  $6.0 \times 10^{-3}$  (yellow color)). On the other hand, the detected intensity in the near-field zone ( $< \lambda_0$ ) is sharply more significant, about 6.0 at  $y_0 = 200 \text{ nm}$  and 20.0 at  $y_0 = 100 \text{ nm}$ . The detection of the high spatial

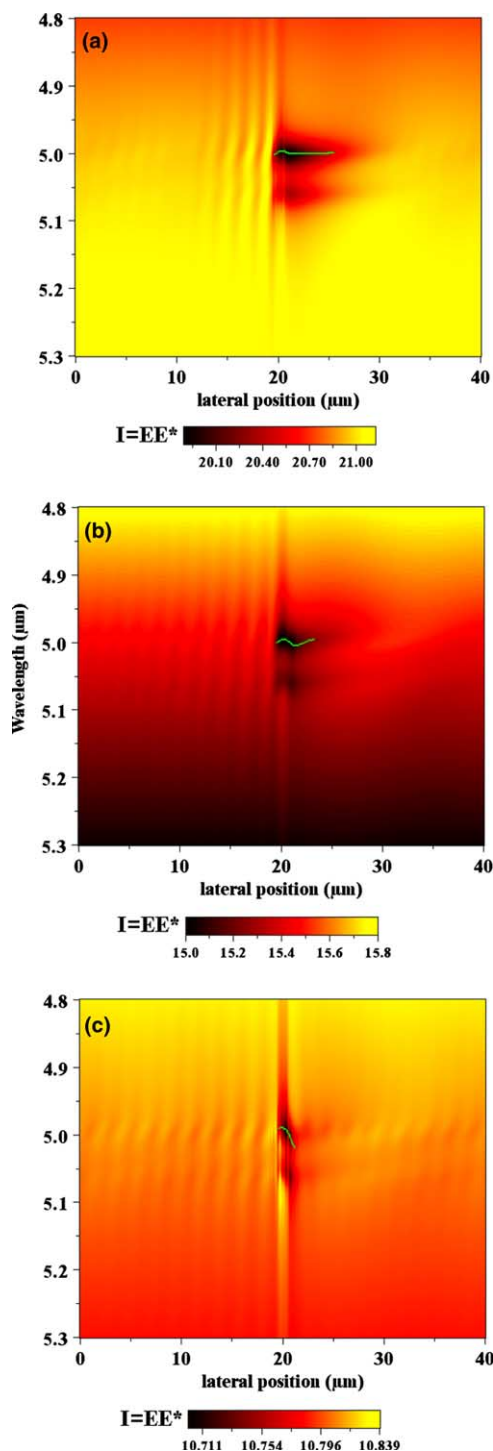


Fig. 9. Distortion of the linear mapping versus the thickness of the sample (size is 1  $\mu\text{m}$ ). Thickness is: (a) 1  $\mu\text{m}$ , (b) 0.5  $\mu\text{m}$ , (c) 0.1  $\mu\text{m}$ .

frequency allows to highlight very clearly the two absorption bands and to position with precision the absorbing object.

#### 4.3. Effect of the lateral size and the sample thickness in the spectroscopy maps

In Fig. 8, we show the spectroscopy maps for an analogous object as previously defined one, but we have reduced its lateral size in such manner to obtain a size less than or equal to the wavelength. Also, we have considered four different lateral size of the sample: 5, 2, 1 and 0.5  $\mu\text{m}$ , and the thickness is kept equal to 1  $\mu\text{m}$ . On different images, we observe that in wavelength the doublet position is reproduced although the absorption zone for  $\lambda_0 = 5.06 \mu\text{m}$  is less marked for the different objects. Concerning the spatial localization of this absorbent object, the diffraction effects are more significant compared to the case of an object greater than the wavelength. The oscillations are also more pronounced compared to those of Fig. 6, and we find that the asymmetrical illumination effect has a tendency to shift laterally the presence of the absorbent object. This is also in agreement with the lateral spreading effect which has been investigated in Fig. 3. As shown in Fig. 6, the absorption bands are underlined by a green sketch in map spectroscopy of Fig. 8. The absorption bands position (with an absorption contrast greater than or equal to 5%) is more spreading laterally, essentially in Fig. 8(c) and Fig. 8(d). In Fig. 8(a) and (b), the distortion bands are weak (less than  $\Delta\sigma = 1 \text{ cm}^{-1}$ ), whereas in Fig. 8(c) and (d) the bands distortion can achieve  $\Delta\sigma = 3 \text{ cm}^{-1}$  ( $\Delta\lambda_0 = 8 \text{ nm}$ ). These results show that the diffraction effects have a direct consequence on the bands distortion.

In Fig. 9, we study the effect of the absorbent zone thickness. For this aim, we choose an absorbent object with a lateral size equal to 1  $\mu\text{m}$  and different thicknesses: 1, 0.5 and 0.1  $\mu\text{m}$ . As previously, the doublet is detected on each figure. In this case, we observe that the lateral spreading is weaker as the sample thickness is (see Fig. 4). For an absorbent object of 0.1  $\mu\text{m}$  thickness, the lateral spreading (2  $\mu\text{m}$ ) is in order of the absorbent object size (1  $\mu\text{m}$ ). Concerning the absorption bands,

the thicker the absorbent object is, the weaker are the distortion bands. But for a thickness of 0.1  $\mu\text{m}$ , the distortion is relatively large and is equal to  $\Delta\sigma = 5 \text{ cm}^{-1}$  ( $\Delta\lambda_0 = 13 \text{ nm}$ ), with absorption contrast relatively weak (about 1%). We may establish that an absorbent sample with a weak thickness contributes in reducing the lateral spreading of the object but enhances the distortion of the absorption bands. We have also observed that when carrying out an incoherent symmetrical PSTM illumination of the sample [22], it is possible to position spatially with more precision, the absorbing object but by increasing the distortion of the absorption bands. In the case of the sample of Fig. 9(c),  $\Delta\sigma$  is found equal to  $7.6 \text{ cm}^{-1}$ , whereas it was estimated to be  $5 \text{ cm}^{-1}$  with an asymmetrical illumination.

## 5. Conclusion

We have shown through this study, using an optical near-field technique, that it is possible to detect the presence of an absorbent object having an optical signature characterized by a doublet in infrared domain. For an absorbent object with an over-wavelength lateral size, both of localization and lateral size of objects as well as the absorption bands position are reproduced. Moreover, in this case, the detection must be performed in near-field and very close to the sample. For an absorbent object with a sub-wavelength lateral size, the localization is also obtained but to the detriment of the lateral spreading (diffraction of edges). In this case, the absorption bands are detected without distortion. The lateral spreading may be strongly diminished when the absorbent object thickness is reduced. In this case, we observe a distortion of bands (about few  $\text{cm}^{-1}$ ) but they are always detected. This distortion is only due to the diffraction effect and not the chemical one. Moreover, in experimental study a minimum of absorption contrast requires a tunable source stable in frequency and a detection system with less noise to detect correctly.

This theoretical study constitutes a preliminary step and calls for more theoretical and experimental investigations, such as the study of power

of resolution and a sample including different absorbent objects with different size and natures. Another interesting idea will be to include the probe and to study its influence on the spectroscopy maps (localization of objects and absorption bands detection) as well as the localized absorbent objects in three dimension.

## References

- [1] P. Dumas, G.L. Carr, G.P. Williams, *Analysis* 1 (2000) 68.
- [2] G.L. Carr, G.P. Williams, *SPIE Conf. Proc.* 3153 (1997) 51.
- [3] G.L. Carr, D. DiMarzio, M.B. Lee, D.J. Larson, *AIP Conf. Proc.* (Woodbury, NY) (1996) 418.
- [4] A. Piednoir, F. Creuset, C. Licoppe, J.M. Ortega, *Second International Conference on Near-field Optics*, Raleigh, USA, 1994.
- [5] A. Piednoir, F. Creuset, C. Licoppe, F. de Fornel, *Workshop on Optical Near-field*, Arc et Senans, France, 1992.
- [6] A. Laherech, R. Bachelot, P. Gleyzes, A.C. Boccara, *Opt. Lett.* 21 (1996) 1315.
- [7] B. Knoll, F. Keilmann, *Nature* 399 (1999) 134.
- [8] R. Hillenbrand, T. Taubner, F. Keilmann, *Nature* 418 (2002) 159.
- [9] N. Gross, A. Dazzi, J.M. Ortega, R. Andouart, R. Prazeres, C. Chicanne, J.-P. Goudonnet, Y. Lacroute, C. Boussard, G. Fonteneau, S. Hocd e, *EPJ-AP* 16 (2001) 91.
- [10] M. Nevi re, P. Viencent, R. Petit, *Nouv. Rev. Opt.* 5 (1974) 65.
- [11] R. Petit (Ed.), *Electromagnetic Theory of Gratings*, Topics in Current Physics, vol. 22, Springer-Verlag, Berlin, 1980 (see Chapter IV, pp. 101–121 by P. Vincent).
- [12] F. Montiel, M. Nevi re, *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994) 3241.
- [13] L. Salomon, G. Bassou, J.-P. Dufour, F. de Fornel, A.V. Zayats, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 125409.
- [14] L. Li, *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996) 1870.
- [15] E. Popov, M. Nevi re, *J. Opt. Soc. Am. A* 10 (2000) 1773.
- [16] D. van Labeke, D. Barchiesi, *J. Opt. Soc. Am. A* 10 (1993) 2193.
- [17] J.-J. Greffet, R. Carminati, *Prog. Surf. Sci.* 56 (1997) 133.
- [18] R. Carminati, J.-J. Greffet, *J. Opt. Soc. Am. A* 12 (1995) 2716.
- [19] R. Carminati, J.-J. Greffet, N. Garcia, M. Nieto-Vesperinas, *J. Opt. Lett.* 21 (1996) 501.
- [20] F. de Fornel, L. Salomon, E. Bourillot, J.P. Goudonnet, *Ultramicroscopy* 42 (1992) 422.
- [21] F. de Fornel, P.M. Adam, L. Salomon, J.P. Goudonnet, A. Santenac, R. Carminati, J.-J. Greffet, *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996) 35.
- [22] G. Chabrier, F. de Fornel, E. Bourillot, L. Salomon, J.P. Goudonnet, *Opt. Commun.* 107 (1994) 347.

# *Annexe B*

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

Optics Communications xxx (2004) xxx...xxx

[www.elsevier.com/locate/optcom](http://www.elsevier.com/locate/optcom)

# Numerical simulations of photon scanning tunneling microscopy: role of a probe tip geometry in image formation

S. Goumri-Said<sup>a,\*</sup>, L. Salomon<sup>a</sup>, J.P. Dufour<sup>a</sup>, F. de Fornel<sup>a</sup>, A.V. Zayats<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique de l'Université de Bourgogne, Faculté des Sciences Mirande, CNRS UMR 5027, 9 Avenue Alain Savary, BP 47 870, 21078 Dijon Cedex, France

<sup>b</sup> School of Mathematics and Physics, The Queen's University of Belfast, Belfast BT7 1NN, UK

Received 13 June 2004; received in revised form 5 September 2004; accepted 6 September 2004

## Abstract

Numerical simulations of two-dimensional probe...object system emulating a photon scanning tunnelling microscope are presented. R-matrix propagation algorithm incorporated into the differential method was used to achieve an extended capability to rigorously model a realistic system consisting of both a probe and a sample. Influence of the probe tip parameters on image formation in scanning near-field microscopy has been investigated. Coupling of the near-field to a single-mode probe and formation of a guided fundamental mode in a probe were investigated for various probe widths and lengths. The influence of the probe taper shape and apex size on near-field images was studied for single mode as well as multimode probes. The obtained results allow comparison of simulated images to unperturbed near-field distribution around the object in the absence of a probe and provide an understanding of the degree of perturbation introduced by probe tip in near-field. It is shown that whole taper of probe contributes to image formation, and thus, a realistic model cannot truncate the probe at distance of few wavelengths from the surface, as is done in the most numerical simulations. The developed model has no computational limitations on optical and geometrical parameters of probe and sample and can be used for realistic simulations of various near-field microscope configurations.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 68.37.Uv; 42.25.Fx; 78.67.n

Keywords: Near-field optics; Photon scanning tunneling microscopy; Differential method

## 1. Introduction

Scanning near-field optical microscopy (SNOM) integrates standard optical methods with scanning probe techniques and allows optical information to be collected with resolution well

\* Corresponding author. Tel.: +33 380 396899; fax: +33 380 396050.

E-mail addresses: [Souraya.Goumri@u-bourgogne.fr](mailto:Souraya.Goumri@u-bourgogne.fr), [sgoumri@u-bourgogne.fr](mailto:sgoumri@u-bourgogne.fr) (S. Goumri-Said).

beyond the diffraction limit [1–3]. Tapered, uncoated or metal coated, optical fiber is often used as near-field probe. The sub-wavelength size of the probe and the ability to control probe–sample separation within near-field region result in high optical resolution [2]. Generally, image of a sub-wavelength object is obtained by recording near-field intensity collected by probe tip when it scans across the sample surface. The sample can be illuminated in reflection, transmission or in total internal reflection. The optical signal can be collected in constant intensity mode, at constant distance from a local surface, or at constant height from the average surface. System of multiple scatterers should be considered to describe the electromagnetic field distribution in vicinity of surface structure. This field distribution is modified in presence of SNOM tip. Thus, the relationship between optical near-field above the surface and the signal detected with SNOM may have complex behaviour that depends on details of the surface structure as well as tip geometry. For this reason, the interpretation of SNOM images still remain a challenging issue.

Theoretical descriptions of scanning near-field microscopes are motivated by efforts to understand SNOM image formation. A complex configuration of the probe–object system leads to many correlated parameters in a theoretical description and as result, difficulties even with numerical simulations of any realistic SNOM geometry. A number of models based on the global [5–9] and non-global [10] approaches have been developed in order to understand the importance of probe influence on recorded image. In the first approximation, the near-field distribution above a surface can be modelled without taking into account the probe. Then, one or another model of detection system is applied to calculate the signal collected by the probe, which is assumed to be the signal measured in experiment [4]. Such approaches are valid if probe influence can be considered as a small perturbation to the near-field of the object. The global models that strictly include both surface structure and dielectric or metal-coated probe make use of numerical methods based on the discretization of the system under consideration. These are Green’s function method [11], multiple-multipole method (MMP) [12], finite-element or

finite-difference time-domain methods [13]. The boundary integral method dealing with a two-dimensional photon scanning tunnelling microscope (PSTM) has attracted much attention [9,14,15]. The general aim of these models is to describe qualitatively and quantitatively the nature of the electromagnetic confinement around the tip probe, the diffracted field by the object and the field collected by the probe, and to investigate the perturbation of the field due to the presence of the probe [16,17]. One must notice that global models are not often used because they are computer memory and time consuming, but they remain necessary when sample–probe coupling is strong. Unfortunately, they are hardly applicable if model system of many light wavelengths size is to be considered. At the same time, the influence of a significantly long SNOM probe might be (and, as will be shown below, is) needed to explain the signal detected in SNOM measurements since the probe length significantly influences the formation of a guided mode which carries optical signal in probe.

In this paper, we propose an accurate global model (in 2 dimensions and in TE polarization) and perform numerical calculations of interaction between sub-wavelength object and dielectric probe of various extensions from few to several tens of the light wavelengths. We will focus on the collection type SNOM in the constant height scanning mode, where the sample is illuminated with an evanescent wave created by the total internal reflection of the incident plane wave. In Section 2, the geometrical configuration of the probe–object system will be defined, and the details of the differential method and the  $R$ -matrix algorithm will be described. Section 3 is devoted to the application of this numerical method to study the influence of probe parameters on image formation. Firstly, the distribution of the electromagnetic field intensity over the surface due to diffraction on sub-wavelength object without and with dielectric probe will be compared. The optimization of numerical parameters and convergence of the method for a probe–object system will be also discussed. Then, we will investigate the dependence of the flux intensity transmitted by the probe on its length for various tip apex shapes in order to investigate the role of probe

length and apex parameters in detection of evanescent waves and a guided mode formation in the single-mode probe. Finally, we will discuss the influence of the tip shape on the signal detected with multi-mode probes. General conclusions, perspectives and applications of the developed model are given in Section 4.

## 2. Numerical simulations

### 2.1. Geometry of the model system

To simulate a PSTM configuration we study the two-dimensional system shown in Fig. 1 which can be considered as three different zones. The first

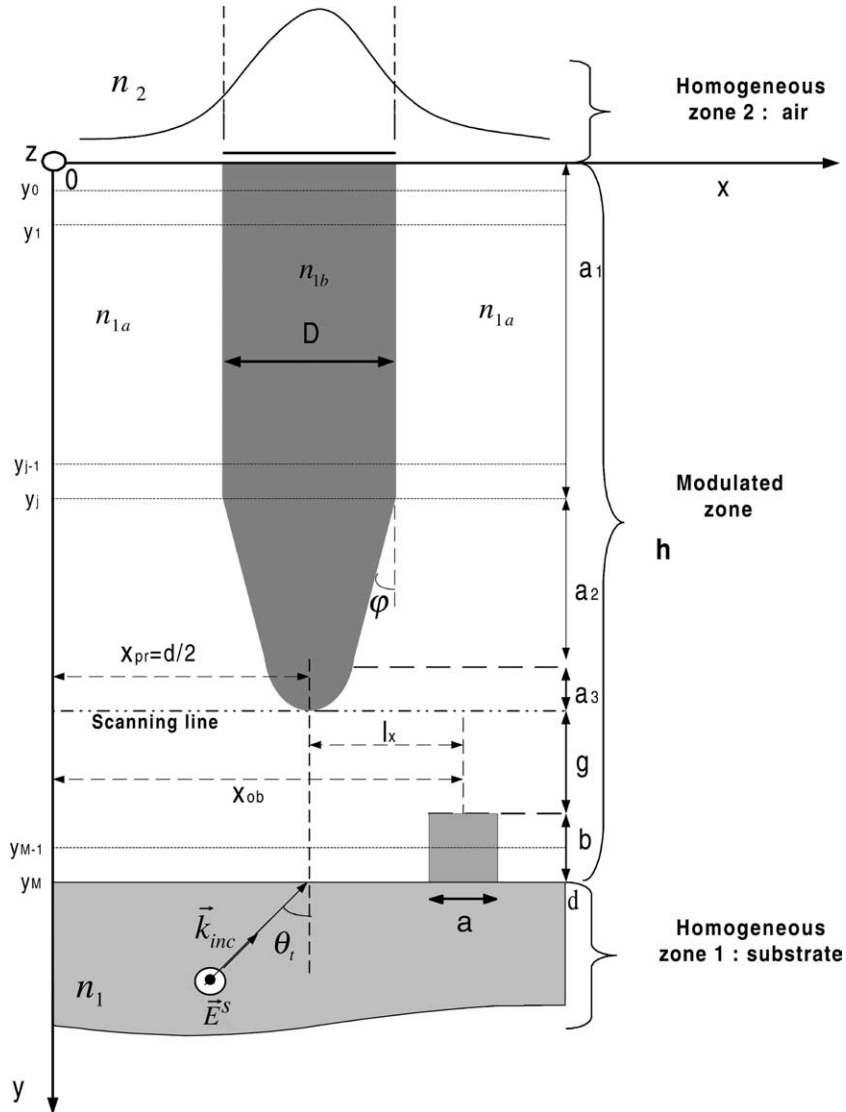


Fig. 1. Geometry of the model, the probe shape and the illumination conditions used in the numerical simulations. The object size is  $(a \times b)$ . The probe length is  $l_p = a_1 + a_2 + a_3$ , where  $a_1$  is the length of a rectangular part,  $a_2$  is the length of a taper, and  $a_3$  is the apex radius.  $D$  is the probe width. The geometrical parameters of the probe taper satisfy the equation  $a_3 = D/2 - a_2 \tan \varphi$ . The probe-object distance is  $g$ .  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_{1a}$ , and  $n_{1b}$  are the refractive indexes of the respective media. The decomposition of the modulated region (probe-object system) into  $M$  consecutive slices is shown.



zone corresponds to the substrate on which the object is placed, this zone is assumed to be semi-infinite and homogeneous (refractive index  $n_1 > 1$ ). The second zone is the modulated zone and includes the probe and the object (both have the same refractive index  $n_{1b} > 1$ ) in air ( $n_{1a} = 1$ ). The third zone is air ( $n_2 = 1$ ). The global system which will be simulated numerically is composed by an infinite number of physical systems repeated periodically with the period  $d$  along the surface. The model probe consists of a rectangular part followed by a trapezoidal form simulating a taper ending with an apex. The probe is described by the set of parameters  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ , and  $\varphi$  as shown in Fig. 1, and the probe width  $D$ . These geometrical parameters satisfy the relation  $a_3 = D/2 - a_2 \tan \varphi$ . The probe length  $l_p$  is defined as  $l_p = a_1 + a_2 + a_3$ . We consider a square dielectric object ( $a \times b$ ) deposited on a dielectric substrate, its refractive index is the same as the refractive index of the probe (Fig. 1). The object is illuminated at the angle of incidence  $\theta = 60^\circ$  greater than the critical angle of total internal reflection  $\theta_c$  with light which has the wavelength  $\lambda_0 = 633$  in vacuum.

## 2.2. Calculations of the electromagnetic field outside the modulated zone

Outside the modulated zone ( $y < 0$  and  $y > h$ ) in the zones 1 and 2, the electric field of the TE mode can be represented by the Rayleigh waves [18]

$$E_z^{(1)}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}y) + B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)}y) \right\} \exp(i\alpha_n x) \quad (1)$$

and

$$E_z^{(2)}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)}y) + B_n^{(2)} \exp(i\beta_n^{(2)}y) \right\} \exp(i\alpha_n x), \quad (2)$$

where  $A_n$  and  $B_n$  are the Rayleigh coefficients,  $\alpha_n = \alpha_0 + 2\pi n/d$ ,  $\alpha_0 = k_0 n_1 \sin \theta$ ,  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ , and  $\beta_n^{(i)} = (k_0^2 n_i^2 - \alpha_n^2)^{1/2}$  for  $i \in \{1, 2\}$  and  $\Re \beta_n^{(i)} + \Im \beta_n^{(i)} > 0$ . When  $\beta_n^{(i)}$  is complex, the modes are evanescent, and they are radiative when  $\beta_n^{(i)}$  is real.

Applying the outgoing wave conditions, Eqs. (1) and (2) can be simplified and the following expressions can be obtained for the coefficients  $A_n$  and  $B_n$ :  $A_n^{(1)} = \delta_{n,0}$  and  $B_n^{(2)} = 0$ . For numerical calculations, only  $(2N + 1)$  number of modes are retained to describe the electromagnetic field. This requires the truncation of the infinite sum in Eqs. (1) and (2), and summation is done from  $n = -N$  to  $n = +N$ .

## 2.3. Calculations of the electromagnetic field in the modulated zone

In the modulated zone, at each ordinate  $y_j$ ,  $j \in [1, M - 1]$ , which separates modulated zones (Fig. 1), we introduce infinitely thin slices, in which Rayleigh expansion is valid. So the field is expanded by a modified Fourier series as follow:

$$E_z(x, y) = \sum_n U_n(y) \exp(i\alpha_n x) \quad (3)$$

and

$$\tilde{H}_x(x, y) = \sum_n V_n(y) \exp(i\alpha_n x) \quad (4)$$

with  $U_n(y) = E_n(y)$  and  $V_n = dE_n(y)/dy$ .

The continuity of the tangential components of  $\mathbf{E}$  and  $\mathbf{H}$  at  $y = y_j$  leads to the continuity of  $E_z(x, y)$  and  $dE_z(y)/dy$  for the TE case.

For one given slice situated between  $(j - 1)$ th and  $j$ th coordinates, the linearity of the diffraction phenomenon yields to a linear relation linking the Rayleigh coefficients of two neighbouring slices by the introduction of  $t$  matrix

$$\begin{bmatrix} U_n(y_j) \\ V_n(y_j) \end{bmatrix} = t^{(j)} \begin{bmatrix} U_n(y_{j-1}) \\ V_n(y_{j-1}) \end{bmatrix}. \quad (5)$$

To obtain  $t^{(j)}$  matrix one should consider  $2 \times (2N + 1)$  independent vectors and calculate their images through a slice of the modulated zone using the Runge–Kutta algorithm. This allows successive calculation of all columns of  $t^{(j)}$  matrix. Consequently, the matrix  $t^{(j)}$  for each slice of the modulated zone can be determined (for more details see [19]). It is also possible to link the electromagnetic field components  $E_z$  and  $\tilde{H}_x$  of the two homogeneous zones and the modulated zone via

the continuity relation at the interfaces of these zones  $y_0 = 0$  and  $y_M = h$ .

Unfortunately, when the modulated zone width becomes comparable to or larger than the wavelength  $\lambda_0$  and period  $d$ , the truncation number  $N$  should be increased, and the differential method becomes unstable. This instability is related to the problem of a numerical contamination of the results due to the growing exponential functions associated with evanescent orders during the Runge–Kutta process. In the following section we describe the method to overcome this problem, namely the  $R$ -matrix algorithm [20].

#### 2.4. Determination of the Rayleigh coefficients using the $R$ -matrix algorithm

Using the previously defined matrix  $t^{(j)}$ , it is possible to link the electric field amplitudes at  $y_{j-1}$  and  $y_j$  coordinates to the magnetic field amplitudes

$$\begin{bmatrix} U_n(y_{j-1}) \\ U_n(y_j) \end{bmatrix} = r^{(j)} \begin{bmatrix} V_n(y_{j-1}) \\ V_n(y_j) \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Here, the matrices  $r^{(j)}$  are defined via the matrices  $t^{(j)}$  as follows:

$$r^{(j)} = \begin{bmatrix} r_{11}^{(j)} & r_{12}^{(j)} \\ r_{21}^{(j)} & r_{22}^{(j)} \end{bmatrix},$$

$$\text{where } \begin{cases} r_{11}^{(j)} = -[t_{21}^{(j)}]^{-1} t_{22}^{(j)}, \\ r_{12}^{(j)} = [t_{21}^{(j)}]^{-1}, \\ r_{21}^{(j)} = t_{12}^{(j)} - t_{11}^{(j)} [t_{21}^{(j)}]^{-1} t_{22}^{(j)}, \\ r_{22}^{(j)} = t_{11}^{(j)} [t_{21}^{(j)}]^{-1}. \end{cases}$$

This formalism allows calculation of the Rayleigh coefficients in the two homogeneous (unmodulated) zones by linking the electric and magnetic components at  $y_0 = 0$  and  $y_M = h$  by

$$\begin{bmatrix} U_n(y_0) \\ U_n(y_M) \end{bmatrix} = R^{(M)} \begin{bmatrix} V_n(y_0) \\ V_n(y_M) \end{bmatrix}, \quad (7)$$

where the matrix  $R^{(M)}$  is determined from the recursive formulas

$$R_{11}^{(j)} = R_{11}^{(j-1)} + R_{12}^{(j-1)} Z^{(j)} R_{21}^{(j-1)},$$

$$R_{12}^{(j)} = -R_{12}^{(j-1)} Z^{(j)} r_{12}^{(j)},$$

$$R_{21}^{(j)} = r_{21}^{(j)} Z^{(j)} R_{21}^{(j-1)},$$

$$R_{22}^{(j)} = r_{22}^{(j)} - r_{21}^{(j)} Z^{(j)} r_{12}^{(j)}$$

with  $Z^{(j)} = (r_{11}^{(j)} - R_{22}^{(j-1)})^{-1}$  and  $R^{(1)} = r^{(1)}$ . The Rayleigh coefficients are obtained using the continuity equations for both electric and magnetic fields at two interfaces:

$$\begin{aligned} U_n(h) &= A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}h) + B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)}h), \\ V_n(h) &= -i\beta_n^{(1)} \left[ A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}h) - B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)}h) \right] \end{aligned} \quad (8)$$

at  $y_M = h$ , and:

$$\begin{aligned} U_n(0) &= A_n^{(2)} + B_n^{(2)}, \\ V_n(0) &= -i\beta_n^{(2)} [A_n^{(2)} - B_n^{(2)}] \end{aligned} \quad (9)$$

at  $y_0 = 0$ .

To overcome the overflow of the numerical calculations linked to the incoming and outgoing electric components in the first homogeneous zone, the following new variables are introduced  $\tilde{A}_n^{(1)} = A_n^{(1)} \exp(-i\beta_n^{(1)}h)$  and  $\tilde{B}_n^{(1)} = B_n^{(1)} \exp(i\beta_n^{(1)}h)$ . The transmitted amplitude  $A_n^{(2)}$  in the homogeneous zone 2 and the reflected amplitude  $\tilde{B}_n^{(1)}$  in the homogeneous zone 1 are deduced from Eq. (8)

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} (I + i\beta_n^{(2)})R_{11}^{(M)} & -i\beta_n^{(1)}R_{12}^{(M)} \\ -i\beta_n^{(2)}R_{21}^{(M)} & (-I + i\beta_n^{(2)})R_{22}^{(M)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_n^{(2)} \\ \tilde{B}_n^{(1)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -i\beta_n^{(1)}R_{12}^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(1)}h)\delta_{n,0} \\ (I + i\beta_n^{(1)})R_{22}^{(M)} \exp(-i\beta_n^{(1)}h)\delta_{n,0} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Once the Rayleigh coefficients are computed, it is possible to determine the electromagnetic field in the two homogeneous zones by summation over the modes involved. The differential method has an advantage in obtaining the modal decomposition of the calculated field intensity into radiative and evanescent components above and under the modulated zone, which allows to evaluate their respective contributions in the total measured intensity.

### 2.5. Guided-mode in a fiber probe

Generally, the probe used in scanning near-field microscopy is an optical fiber with a length of few tens of centimeters. The energy detected by the probe apex is coupled into and propagates through the fiber by exciting one or several eigenmodes in the fiber. To describe the coupling of the electromagnetic field to the probe numerically, we have considered a probe of finite-length and calculated the coupling efficiency of the field detected by the tip apex to the field propagating through the probe. We describe the case when the optical probe can sustain only TE modes. Consequently, we can calculate the transmitted signal using the amplitudes of the guided-modes in the probe [21]. All mathematical details of these calculations are presented in [Appendix A](#), and the expression for the detected signal  $\phi_{\text{tot}}$  is given by

$$\phi_{\text{tot}} \approx \sum_{m=1}^K \frac{\gamma_m}{2\omega\mu_0} \frac{\left| \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(2)} E_{zm}^* dx \right|^2}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx}, \quad (10)$$

where  $K$  is the number of eigenmodes supported by the probe,  $\{\text{rad}\}$  is the set of all radiative Rayleigh modes propagating in the probe,  $E_{zm}$  is  $z$ -component of electric field of  $m$ th eigenmode of the probe,  $\omega = 2\pi c/\lambda_0$ ,  $\mu_0$  is vacuum magnetic permeability, and  $\gamma_m$  is a mode propagation constant depending on refractive indices and probe width. This approximate formula gives an over-estimated value of field coupling efficiency at probe taper but the deviations are on average less than 5% of the detected signal.

## 3. Role of a probe geometry in the image formation

### 3.1. Sub-wavelength object without a probe

To test the numerical model and establish a basis for further studies of a tip-sample interaction,

as a first step we calculate the near-field intensity distribution over a dielectric sub-wavelength object ( $100 \times 100 \text{ nm}^2$ ) on an infinitely thick substrate. The object is illuminated in the total internal reflection configuration. This configuration has been chosen to compare our results with other theoretical models obtained by different methods [14,22,23].

Since we are using a periodic method to study an individual structure, it is important to adapt the system in such a manner that the interaction between neighbouring structures does not affect the calculated electromagnetic field related to an individual object. To achieve this, we have carried out the tests by varying the period  $d$  of the model system from 5 to 48  $\mu\text{m}$ . It appeared that the near-field intensity related to the object calculated at the distance of 110 nm from the substrate surface and thus, 10 nm from the object, varies less than 0.2% if  $d \geq 24 \mu\text{m}$ .

To ensure the convergence of the solution, the number of modes  $(2N + 1)$  used in the numerical calculations must be optimized for any given period  $d$ . This can be done by studying the diffracted field in the far- and near-field zones. In the far-field zone ([Table 1](#)), the intensity of diffracted light as well as its relative variation with number of modes  $N$  show a good convergence (in all cases the stratification number was  $M = 5$ ). The same calculations were performed in the near-field zone. From these results the number of modes needed for convergence of the solution for any chosen period can be estimated. E.g.,  $(2N + 1) = 513$  for  $d_1 = 24 \mu\text{m}$  or  $(2N + 1) = 1025$  for  $d_2 = 48 \mu\text{m}$  provides in the near-field the transmission variations  $(T_{i+1} - T_i)/T_i \leq 0.1\%$ . The relative variations of the intensity in all points of the considered system have a comparable stability. Thus, an isolated object can be modelled by considering a periodic global system.

Table 1

The transmission coefficient  $[T (\times 10^{-4})]$  for two periods  $d$  used in the numerical calculations and different values of  $(2N + 1)$

	$2N_1 + 1 = 257$	$2N_2 + 1 = 513$	$2N_3 + 1 = 1025$	$2N_4 + 1 = 2049$
$d = 24 \mu\text{m}$	4.370 (31%)	4.476 (2%)	4.480 (0.1%)	4.480 (0.0%)
$d = 48 \mu\text{m}$	1.503 (55%)	2.187 (30%)	2.241 (3%)	2.243 (0.1%)

Shown in brackets is the relative variation of the transmission  $[(T_{i+1} - T_i)/T_i]$  when the number of modes is doubled.

Let us discuss now the physical origin of near-field distribution in Fig. 2. The distribution exhibits an asymmetric central peak arising from the near-field diffraction by a sub-wavelength object illuminated asymmetrically. The object is situated between the main minimum and maximum of the intensity distribution. An oscillation pattern is observed from both sides of the object at distances of up to tens of microns. These oscillations appear with different periods on opposite sides of the object due to the interference between the diffracted waves scattered by the object (with the components of the wave vector parallel to the surface) and the evanescent incident wave above the surface [23–25]. This phenomenon does not arise from the employed periodic differential method. Similar calculations carried out with the Coupled Dipoles method [22] show the same oscillation phenomenon. The amplitude of the oscillations decreases with distance from the object, and far from it the intensity can be considered as quasi-constant ( $I \approx 0.35$  for a unit incident field) that corresponds well to the evanescent field above a smooth surface (without an object) which can be calculated analytically [4,24].

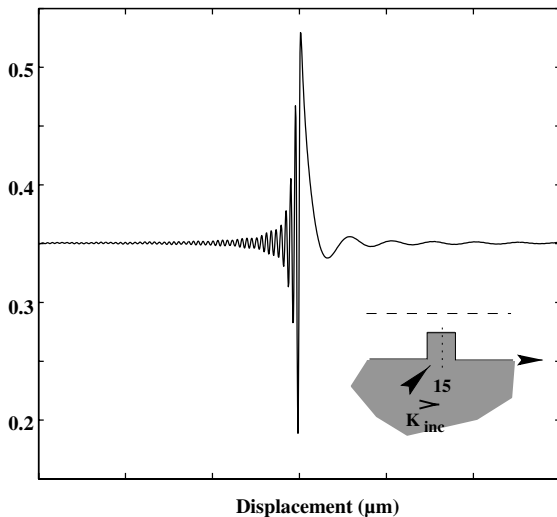


Fig. 2. Electric field intensity distribution in the scanning plane above the object (at the distance  $g = 10$  nm) in the absence of the probe. Object size and refractive index are  $100 \times 100$  nm<sup>2</sup> and  $n = 1.458$ , respectively, the refractive index of the substrate  $n = 1.458$ , the angle of incidence is  $\theta = 60^\circ$ , the illuminating light wavelength is  $\lambda = 633$  nm.

Thus, using the described technique, we have succeeded to describe the field distribution around an individual object using a periodical method and eliminated the electromagnetic interaction between the neighbouring objects in the model system. This approach is extremely important since, thanks to the  $R$ -matrix algorithm, it allows us to treat large-size objects in the near-field that is extremely difficult to achieve with other numerical methods based on discretization of the model system.

### 3.2. Sub-wavelength probe above a surface without an object

In this section, we study the transmitted flux intensity through different probes scanned across a flat surface (without the diffracting sub-wavelength object) in order to understand the coupling of the electromagnetic field and formation of guided fundamental mode in a SNOM probe. We consider a probe positioned at a distance of 110 nm from the substrate surface, which is illuminated in total internal reflection. (In the following sections, the constant-height mode near-field images will be modelled at this distance from the surface.) The probe width is fixed at  $D = 200$  nm, and its length is varied in the interval [10 nm, 10 μm]. This is an interval of probe lengths which are important for consideration not only fiber probes but also nanofabricated SNOM probes based on AFM cantilevers. An infinitely long probe of such width can be considered as a single-mode slab with a propagation constant  $\gamma_0 = 1.2396 \times 2\pi/\lambda_0$  (see [21]). However, in the case of a finite length probe, due to the vertical limitation of the probe and the presence of the substrate, the transmitted signal will be different than in the case of an infinite waveguide. With our method, the transmitted flux intensity which is guided in the fundamental mode of the probe can be calculated using the formalism outlined in Appendix A.

The dependencies of the flux intensity transmitted through the fundamental mode on the probe length are presented in Fig. 3 for different tapers and tip sizes: (a)  $a_3 = 10$  nm; (b)  $a_3 = 50$  nm; (c) rectangular probe without apex  $a_3 = 0$  nm. We can distinguish two different regimes of the probe transmission: the first one corresponds to a probe

length smaller than 500 nm approximately and the second one is for longer length.

When the probe length is smaller than 500 nm, a strong increase in the transmitted signal is observed. The shape of variation of the transmitted intensity as a function of the length depends strongly on the probe form. This small probe is behaving as a diffracting object (cf. apertureless or scattering-type scanning near-field microscopy [1,26]). In the second regime, the transmitted signal oscillates periodically around a constant value as a function of the length. The origin of these oscillations is the multiple reflection of the transmitted light at the terminations of the probe, so that the transmitted signal has maximum when the reflected waves are in phase at the output end of the probe. The period of oscillations depends on the propagation constant  $\gamma_0$  of the guided mode in the probe. The numerically obtained period corresponds well to the expected theoretical value (512 nm). From Fig. 3 one can also estimate the reflection coefficient of the guided mode on the terminations of the probe  $R \approx 0.2$ . By analyzing the visibility of the oscillations, one can obtain an estimation of the probe length needed for establishment of the guided mode in the probe.

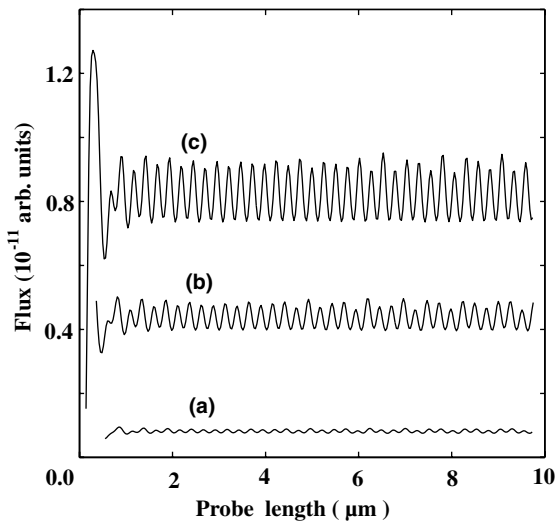


Fig. 3. The dependence of the transmitted flux intensity on the probe length  $l_p$  for three different apex shapes: (a)  $a_3 = 10$  nm and  $\varphi = 10^\circ$ ; (b)  $a_3 = 50$  nm and  $\varphi = 10^\circ$ ; (c) rectangular probe without the apex ( $a_3 = 0$  nm and  $a_2 = 0$  nm). The probe width is  $D = 200$  nm.

These results show that the probe length cannot be neglected in the SNOM image formation modelling since it significantly influences the detected signal if the probe length is taken too small in the model. However, it is enough to consider a probe of few microns length to take into account the field coupling to and formation of the guided mode in the probe. This result shows that the taper behaves as a filter: smaller the taper angle  $\varphi$  is, smaller the amount of the signal collected by the taper and shorter the probe length needed to reach the guiding mode (regular oscillation) is. The oscillations in the first zone (before 500 nm) show that all the light transmitted by the taper to the slab excite many modes. But only one mode is allowed, the other modes are leaky. Consequently, as the probe length is increased, the probe supports only the fundamental mode.

The influence of the apex shape and size which is important for reconstruction of the field distribution above the surface is less significant for the establishment of the guided mode. As expected, for a smaller size of the probe the lower average transmitted signal is observed. This result is in a good agreement with the results of Tanaka et al. [14,15]. The dependencies of the average signal carried by the guided mode on the tip taper shape show that a smaller tip apex, at least in the case of a 2D symmetric probe discussed here, results in a smaller coupling efficiency of the evanescent field to the guided modes in the fiber for a given opening angle  $\varphi$  (and thus, a taper length).

### 3.3. Imaging with a single-mode probe

Having analyzed the near-field patterns associated with the sub-wavelength object on a surface and the coupling to the wave-guided mode in the probe, we now consider the probe-object system in order to study the influence of the probe on the detected near-field signal. The probe width is maintained equal to  $D = 200$  nm as before, and we have arbitrarily chosen a probe length to have a well-established guided mode in the probe. The object size is kept to  $100 \times 100$  nm<sup>2</sup> as in Fig. 2. We are interested in the transmitted flux intensity through the probe in constant-height scanning mode [1–3]. The probe-interface distance is taken

equal to 110 nm, which means that the object–probe distance is 10 nm when the probe is above the object, the same distance at which as for the field distribution calculated without probe in Fig. 2.

The images of the object obtained with a different single-mode probes are presented in Fig. 4. For all probe shapes, the detected signal has a peak when the probe is scanning over the object but the measured intensity distribution differs from the one in the absence of the probe (cf. Figs. 2 and 4). The contrast of the near-field pattern around the object is also different compared to the case of the unperturbed near-field distribution. The same as in Fig. 2, the long- and short-period oscillations are observed on right and left hand sides of the object, respectively. However, these weak oscillations do not have a constant period (the period increases with the distance from the object) contrary to the case in the absence of the probe. These background oscillations are much stronger confined to the object (about 1.5  $\mu\text{m}$ ) than in the absence of the probe (several tens of microns). The origin of these oscillations is the electromagnetic interaction between the tip and the object due to multiple reflection of the scat-

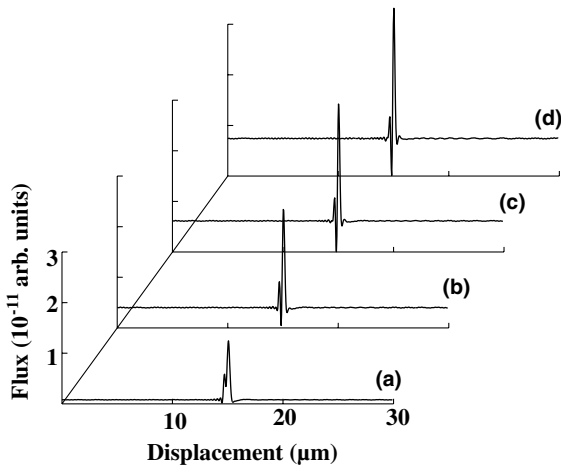


Fig. 4. Image of the object in Fig. 2 obtained in constant-height scanning mode ( $g = 10$  nm) with a single-mode probe for different apex shapes: (a)  $a_1 = 9185$  nm,  $a_3 = 10$  nm and  $\varphi = 10^\circ$ ; (b)  $a_1 = 9272$  nm,  $a_3 = 50$  nm and  $\varphi = 10^\circ$ ; (c)  $a_1 = 9520$  nm,  $a_3 = 100$  nm and  $\varphi = 10^\circ$ ; (d) rectangular probe ( $a_3 = 0$  nm,  $a_2 = 0$  nm) and  $a_1 = 6815$  nm. The probe width is  $D = 200$  nm.

tered propagating as well as evanescent field components. When the probe is laterally far from the object, the detected signal is identical to the signal collected in the absence of the object (Fig. 3) confirming that it is related to the evanescent field of the illuminating light above the surface.

The perturbation introduced in the near-field (and thus SNOM images), depends on the probe shape and size. The change of these parameters results in the modifications of the overall detected signal as well as signal-to-background ratio. With the increase of the tip size, the overall detected signal increases both above the object and far from it, but this increase depends on the tip position that is related to the coupling of radiative scattered modes and the tip–object interaction. This leads to the decrease of the signal-to-background ratio and contrast of the images with the increase of the tip size in spite of the larger detected signal. The signal-to-background ratio is more than 10 for a 10 nm tip apex decreasing to about 4 for a 100 nm apex or a rectangular probe. The question of the quantitative derivation of the resolution in this case is very difficult taking into account strongly oscillating fields near the object. However, we can roughly estimate the resolution and possibility to recover the position of the object from the near-field images by comparing the positions of the main minimum and maximum of the recorded intensity distribution. The results show that the resolution weakly depend on the probe tip size in this case.

### 3.4. Imaging with a multimode probe

In most previous papers devoted to the studies of the probe influence on the near-field images, the probe was considered as a sub-wavelength waveguide. The real probes, however, are significantly wider and in many cases multimode fibers are used. To study the influence of the probe width, we have considered two types of probes with  $D = 4$  and 25  $\mu\text{m}$  emulating multimode waveguides. The formation of the guided modes in such multimode waveguides happens in the same way as for a single mode probe at the distance of only few microns after the taper. However, with the probe length increase, the intensity oscillations of various

periods are observed corresponding to the different eigenmodes in the probe. The relative power of the different modes shows that the odd modes (in particular, the fundamental mode) are chiefly excited. This is due to the symmetric shape of the probe.

Figs. 5–7 present the calculated images of the square object for various multimode probes. The same as for a single-mode probe, the field distribution related to the object is observed on the background which depends on the probe width as well as taper opening angle and apex size. The overall structure of the images is significantly different from the case of a single-mode probe. The main feature is the modification of the background measured and contrast of the images. For the probe of  $D = 4 \mu\text{m}$  width and the taper angle  $\varphi = 10^\circ$  (the same as in the Fig. 4), in addition to the higher overall background, one can see an additional, bell-shaped background signal of about  $10 \mu\text{m}$  width around the object (Fig. 5). The strongly confined peaks that determine the position of the sub-wavelength object are observed on this enhanced background. With the increase of the taper angle (Fig. 6), both uniform and bell-shaped backgrounds significantly grow indicating the increase in the field coupling efficiency to the guided modes of the probe. At the same time, the additional background becomes stronger con-

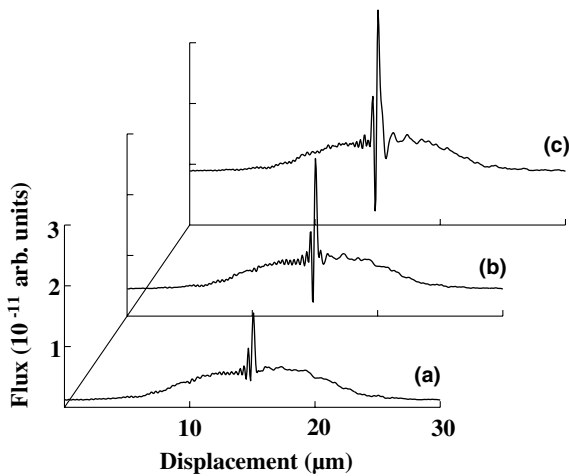


Fig. 5. Image of the object of Fig. 2 obtained in constant-height scanning mode ( $g = 10 \text{ nm}$ ) with a multimode probe ( $D = 4 \mu\text{m}$ ) for three different apex size and  $\varphi = 10^\circ$  taper: (a)  $a_3 = 10 \text{ nm}$ ; (b)  $a_3 = 50 \text{ nm}$ ; (c)  $a_3 = 100 \text{ nm}$  and  $a_1 = 9 \mu\text{m}$ .

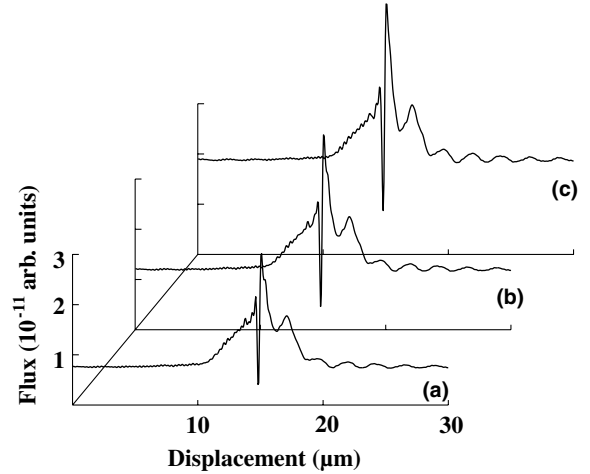


Fig. 6. Image of the object of Fig. 2 obtained in constant-height scanning mode ( $g = 10 \text{ nm}$ ) with a multimode probe ( $D = 4 \mu\text{m}$ ) for three different apex size and  $\varphi = 30^\circ$  taper: (a)  $a_3 = 10 \text{ nm}$ ; (b)  $a_3 = 50 \text{ nm}$ ; (c)  $a_3 = 100 \text{ nm}$  and  $a_1 = 9 \mu\text{m}$ .

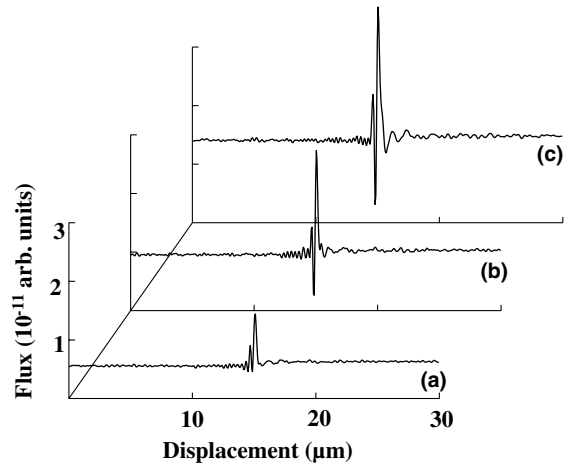


Fig. 7. Image of the object of Fig. 2 obtained in constant-height scanning mode ( $g = 10 \text{ nm}$ ) with a multimode probe ( $D = 25 \mu\text{m}$ ) for three different apex size and  $\varphi = 10^\circ$  taper: (a)  $a_3 = 10 \text{ nm}$ ; (b)  $a_3 = 50 \text{ nm}$ ; (c)  $a_3 = 100 \text{ nm}$  and  $a_1 = 20 \mu\text{m}$ .

ned to the object while short- and long-period oscillations in the signal appear similar to the oscillations in the unperturbed field distribution (Fig. 2). For both tip openings, in the case of this multimode probe the signal-to-background ratio is almost independent on the tip apex size ( $\sim 2$  for all tips) in contrast to the case of a single-mode probe discussed above.

The measured intensity distribution for this probe is probably related to the radiative modes due to scattering on the object and collected by the probe. The efficiency of the coupling depends on the length and angle of the taper ( $\varphi$ ) as well as on the object position from the probe. The farther the probe moves away from the object, the smaller is the coupling efficiency of the propagating field components and the bell-shaped background intensity diminishes. Since the object is illuminated in the asymmetrical manner (Fig. 1), the background shape is also asymmetric. At the same time, the uniform background far from the object is related to the coupling of the evanescent components of the illuminating field over the flat surface (Fig. 3).

For an even wider probe based on a multimode guide with a core of  $25\ \mu\text{m}$  width (Fig. 7), the image dependence on the probe parameters is similar to the smaller multimode probe discussed above. The contrast is hardly affected by the probe width. The difference in the shape of the background (on the presented length-scale) is due to the much larger length of the taper in this case for the same opening angle and the apex size. For  $D = 25\ \mu\text{m}$  and  $\varphi = 10^\circ$ , the taper length is about  $70\ \mu\text{m}$  (compared to  $11\ \mu\text{m}$  for  $D = 4\ \mu\text{m}$  probe). The probe detects the radiative components of the field scattered by the object at very large distances, about  $25\ \mu\text{m}$  from both sides of the central peak (Fig. 8). One can see also from Figs. 5 and 8 that the bell-shaped background has at least the probe width. When the probe is scanning just above the object, the images of the intensity distribution obtained with the different tips having the same apex size and opening angle are very similar (Figs. 5–7). The maximum intensity of the bell-shaped background is about the same for all probe width for each given value  $a_3$  of the apex size. These tendencies indicate that the collected signal mainly depends on the sample scattering despite the transmitted flux is distributed over different eigenmodes of the fiber probes. In all simulated images, the asymmetry of the transmitted flux distributions is observed. This behaviour is due to the asymmetric illumination of the sample.

From considerations of the images simulated for various probe widths and parameters (Figs.

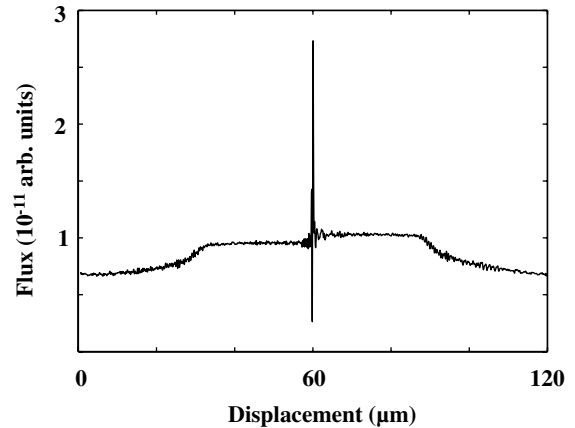


Fig. 8. The image as in Fig. 7(b) shown on the larger length-scale around the object ( $d = 120\ \mu\text{m}$ ).

5–8), the signal detected by a SNOM probe results from three contributions. (i) The signal associated with frustration of evanescent field above the substrate by probe apex and taper when the probe is far away from the sub-wavelength object. Larger is the apex radius (Figs. 5 and 6) and the taper opening angle  $\varphi$ , stronger is the perturbation of the evanescent field and the detected intensity. (ii) The signal related to the light scattered by the object and collected by the probe when it is located close to the object. For a given sub-wavelength object, the lateral extension of the field that can be collected depends on the taper opening angle  $\varphi$  and, in less important manner, on the apex radius  $a_3$ , as can be seen from images in Figs. 5–7. (iii) The strongly localized signal when the probe is located just above the object. The observed intensity enhancement indicates on the strong coupling between the tip and the object so that very strong evanescent field present above the object is frustrated and converted to a guiding modes in the SNOM probe. One must notice here that the bell-shaped background does not appear with the single mode probe, due to its single modal nature. In this case, the coupling between the radiative waves generated by the structure and the only mode of the probe is weaker (even negligible in our case) than the coupling with modes of multimode probe. Consequently, the bell-shaped background is not observed in the single mode probes.



Usually, in the case of dielectric probes, one considers that the near-field image is proportional to the intensity of the electric field close to the surface. It is seen from our results that this proportionality is affected by the geometrical parameters of the probe, the sample as well as the probe–sample distance. This is in agreement with previous experimental results obtained with multimode probes [24,27].

#### 4. Conclusion

This paper presents the numerical analysis of a complete two-dimensional PSTM configuration which includes a substrate, an object, and an extended probe. The application of the differential method with the  $R$ -matrix algorithm has allowed us to calculate the transmitted flux intensity through an arbitrary long probe, and to study the near-field image dependencies on the probe parameters. Application of this method to an isolated system has been achieved by considering a periodical system with the low electromagnetic interaction between the individual elements, which requires the increase of a period and as a consequence, significant number of modes for an accurate description of the system. With the  $R$ -matrix algorithm the numerical modeling can be achieved for all modes diffracted by the system without encountering numerical instabilities during the integration process.

The probe–object interaction and the influence of an apex size and a taper shape on the image formation in a PSTM have been studied. The image formation is determined by the coupling of evanescent and propagating scattered fields to a guided mode in a probe. The intensity transmitted in the guided modes provides the signal detected in the experiment. The approach based on the investigation of the guided modes formation in the SNOM probe and coupling efficiencies of different field components are conceptually very difficult to address numerically with most other methods because of the combination of sub-wavelength scatterers with a large over-wavelength guiding probe tip.

The interaction of a probe with the electromagnetic field near a sample surface (and related perturbations) depends on the probe parameters and results in the differences between the electromagnetic near-field intensity distribution in the absence of a probe and the signal detected in the experiment. Independently of the probe taper shape, the fundamental mode is established in a probe just after few microns from the taper. The transmitted intensity depends strongly on the probe characteristics, consequently the images of the near-field intensity distribution above the surface can be very different. The overall intensity and signal-to-background ratio depend on the taper parameters and, in general, behave differently for single-mode and multi-mode probes. With the increase of the tip size, the overall detected signal increases for all kinds of probes, however, signal-to-background ratio decreases in the case of a single-mode probe, but is almost constant in the case of multimode probes, despite the latter gives a significant oscillating background.

The image observed with SNOM may not, in general, reproduce the electric field intensity distribution over the object, but the resemblance can be quite good. The hypothesis that assumes the probe–sample interaction as a small perturbation has been used widely in SNOM measurements with uncoated tips. Our simulations show that the coupling efficiencies of the evanescent and propagating field to guided modes in the SNOM probe can have significant influence on the obtained images and their correlation to the field distribution over the sample surface. This is in a good agreement with the general considerations of the transfer functions of the collection mode SNOM [28].

In the case of fiber SNOM tips one might expect additional effects which are not covered in the 2D model but will be important in a 3D model, such as influence of the coupling of the field components to the guided modes on the polarization of electromagnetic field (this in turn depends on the experimental conditions, for example, light and surface plasmon polariton waves have different polarization components) and the field-enhancement effects at a tip apex. Three-dimensional simulations based on the presented numerical approach

are possible with a high-performance computer. Most of the SNOM configurations including ones with metal-coated probes can be modelled. This will allow the development of understanding of the image formation and resolution of the SNOM experiments and influence of the probe parameters on the detected signal and recorded images.

### Appendix A. Determination of the signal transmitted through the guided modes of the probe

The differential method employed for the calculations of the field distributions in the modulated and homogeneous zones provides the total electromagnetic field in the homogenous zone 2 above the probe where the fields propagated through the probe and fields diffracted directly by the object are present. In the experiment, however, only the field guided through the probe is detected. Thus, to model SNOM operation, we need to separate the fields that arrive in the zone 2 via the guided modes of the probe.

To achieve this, let us consider the total electric field in the homogeneous zone 2 given by

$$E^{(2)}(x, y) = \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \left[ A_n^{(2)} \exp(-i\beta_n^{(2)}y) \right] \exp(i\alpha_n x), \quad (\text{A.1})$$

where  $\{\text{rad}\}$  is the set of all the radiative Rayleigh modes and the contribution of the evanescent modes related to the surface and object was neglected. The field that arrives in the zone 2 via the multimode probe can be expressed via the eigenmodes of the probe

$$E_p^{(2)} = \sum_{k=1}^K \rho_k E_{zk} \exp(-i\gamma_k y),$$

where  $E_{zk}$  is the  $z$ -component of the electric field of the  $m$ th eigenmode of the probe,  $K$  is the total number of eigenmodes supported by the probe,  $\gamma_k$  is the mode propagation constant depending on refractive indices and the probe width,  $\rho_k$  characterizes the rate of coupling of the field at the place of the probe taper to the guided-mode field in the probe. Thus, the total field in the zone 2 can be represented as

$$E^{(2)}(x, y) = E_p^{(2)} + E_c^{(2)}(x, y), \quad (\text{A.2})$$

where  $E_c(x, y)$  is the field that arrived in the zone 2 not through the probe. To calculate  $\rho_k$ , Eq. (A.2) can be multiplied by  $E_{zm}^* \exp(i\gamma_m y)$  and integrated over the plane perpendicular to the propagation axis. Since the system is periodic and its period  $d$  is large compare to the lateral extension of the guided mode ( $C_{\text{probe}}$ , Fig. 1), the integration can be performed over one period  $[0, d]$ . Thus, the field overlap can be expressed as

$$\begin{aligned} \exp(i\gamma_m y) \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(2)} E_{zm}^* dx \\ = \rho_m \int_0^d |E_{zm}|^2 dx + \exp(i\gamma_m y) \int_0^d E_c^{(2)} E_{zm}^* dx, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

since due to the orthogonality of the eigenmodes  $\int_0^d E_{zm} E_{zk}^* dx = 0$ . The last term in Eq. (A.3) describes the overlap in the zone 2 of the field scattered by the object and the probe apex but not coupled to the guided modes and the field of the guided modes in the probe. Numerical modelling shows that this term gives just a small correction to the coupling coefficients and can be neglected to simplify considerations.

Taking this into account, we have from Eq. (A.3)

$$\rho_m \approx \frac{\exp(i\gamma_m y) \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(2)} E_{zm}^* dx}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx}. \quad (\text{A.4})$$

This approximate formula gives an overestimated value of the field coupling efficiency at the probe taper but the deviations are on average less than 5% of the detected signal with maximum about 10% in some particular cases. Thus, the field propagating through the  $m$ th guided-mode is

$$e_{zm} \approx \frac{\sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_{zm}^* E_n^{(2)} dx}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx} E_{zm}. \quad (\text{A.5})$$

The time-averaged power flux  $\phi_m$  for the  $m$ th eigenmode in the waveguide is given by the integral over the guide cross-section of the  $y$ -component of the Poynting vector:  $\phi_m = -\int_0^d S_{ym} dx$ . The Poynting vector for TE-mode is

$$S_{ym} = \frac{1}{2} e_{zm} h_{xm}^* = -\frac{\gamma_m}{2\omega\mu_0} |e_{zm}|^2 \quad (\text{A.6})$$

and the final expression for the power flux carried by the  $m$ th eigenmode through the waveguide is

$$\phi_m \approx \frac{\gamma_m}{2\omega\mu_0} \frac{\left| \sum_{n \in \{\text{rad}\}} \int_0^d E_n^{(2)} E_{zm}^* dx \right|^2}{\int_0^d |E_{zm}|^2 dx}. \quad (\text{A.7})$$

The total signal delivered by a probe can be found by summation over all eigenmodes:  $\phi_{\text{tot}} = \sum_{m=1}^K \phi_m$ .

## References

- [1] D. Courjon, C. Bainier, in: *Le champ proche optique, théorie et application*, Springer-Verlag, Paris, 2001.
- [2] S. Kawata, M. Ohtsu, M. Irie, in: S. Kawata, M. Ohtsu, M. Irie (Eds.), *Nano Optics*, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [3] F. de Fornel, *Evanescent Waves from Newtonian Optics to Atomic Optic*, Springer-Verlag, Berlin, 2001, ISBN 3-540-65845-9.
- [4] L. Salomon, F. de Fornel, J.-P. Goudonnet, *J. Opt. Soc. Am. A* 8 (1991) 2005.
- [5] C. Girard, D. Courjon, *Phys. Rev. B* 42 (1990) 9340.
- [6] J.C. Weeber, F. de Fornel, J.-P. Goudonnet, *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996) 944.
- [7] A. Castiaux, A. Dereux, J.P. Vigneron, C. Girard, O.J.F. Martin, *Ultramicroscopy* 60 (1995) 1.
- [8] A. Castiaux, H.U. Danzebrink, X. Bouju, *J. Appl. Phys.* 94 (1998) 52.
- [9] S.I. Bozhevolnyi, B. Vohnsen, E.A. Bozhevolnaya, S. Berntsen, *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1995) 2381.
- [10] D. Van Labeke, D. Barchiesi, *J. Opt. Soc. Am. A* 10 (1993) 2193.
- [11] R. Carminati, J.-J. Greffet, *Opt. Commun.* 116 (1995) 316.
- [12] L. Novotny, D.W. Pohl, P. Regli, *Ultramicroscopy* 57 (1995) 180; *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994) 1769.
- [13] H. Furukawa, S. Kawata, *Opt. Commun.* 132 (1996) 170.
- [14] K. Tanaka, M. Tanaka, T. Omoya, *J. Opt. Soc. Am. A* 15 (1998) 1918.
- [15] K. Tanaka, M. Tanaka, K. Katayama, *Opt. Rev.* 6 (1999) 249.
- [16] J. Aizpurna, S.P. Apell, R. Berndt, *Phys. Rev.* 62 (2000) 2065.
- [17] Porto et P. Johansson, S.P. Apell, T. Lopez-Ryos, *Phys. Rev.* 67 (2003) 085409.
- [18] R. Petit, in: R. Petit (Ed.), *Electromagnetic Theory of Gratings*, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [19] M. Nevière, *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994) 1835.
- [20] F. Montiel, M. Nevière, *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1993) 3291.
- [21] M.J. Adam, in: *An Introduction to Optical Waveguide*, Wiley, New York, 1981.
- [22] E.M. Purcell, C.R. Pennypacker, *Astro-Phys. J.* 186 (1973); A. Rahmani, P.C. Chaumet, F. de Fornel, C. Girard, *Phys. Rev. A* 56 (1997) 3254.
- [23] A. Sentenac, J.-J. Greffet, *Ultramicroscopy* 57 (1995) 246.
- [24] F. de Fornel, P.M. Adam, L. Salomon, J.P. Goudonnet, A. Santenac, R. Carminatti, J.J. Greffet, *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996) 35.
- [25] R. Carminati, J.-J. Greffet, *J. Opt. Soc. Am. A* 12 (1995) 2716.
- [26] R. Hillenbrand, T. Taubner, F. Keilmann, *Nature* 418 (2002) 159.
- [27] L. Salomon, C. Charbonier, F. de Fornel, P.M. Adam, P. Guérin, F. Carcenac, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 17072.
- [28] S.I. Bozhevolnyi, B. Vohnsen, E.A. Bozhevolnaya, *Opt. Commun.* 172 (1999) 171.

# Bibliographie

- [Abramowitz et Stegun 65] Abramowitz (M.) et Stegun (I. A.), *Handbook of Mathematical Functions*, 1 éd., Dover, New York, 1965.
- [Adam 81] Adam (M.J.), *An introduction to Optical Waveguide*, 1 éd., John Wiley and sons, New York, 1981.
- [André *et al.* 00] André (P.), Charra (F.), et Pileni (M. P.), *Resonant electromagnetic field cavity between scanning tunneling microscope tips and substrate*, *J. Appl. Phys.* **91** (2000), 3028–3036.
- [Ash et Nicholls 72] Ash (E. A.) et Nicholls (G.), *Super-résolution Aperture Scanning Microscope*, *Nature* **237** (1972), 510–512.
- [Ashino et Ohtsu 98] Ashino (M.) et Ohtsu (M.), *Fabrication and evaluation of a localized plasmon resonance probe for a near-field optical microscopy/sepectroscopy*, *Appl. Phys. Lett.* **31** (1998), 1302–1304.
- [Bachelot *et al.* 95] Bachelot (R.), Gleyzes (P.), et Boccara (A.), *Near-field optical microscopebased on local perturbation of a diffraction spot*, *Opt. Lett.* **20** (1995), 1924–1926.
- [Bachelot 96] Bachelot (R.), *Etude et réalisation d'un microscope optique en champ proche utilisant une sonde sans ouverture*, Thèse de doctorat, Université Denis Diderot, Paris, France, 1996.
- [Baida *et al.* 95] Baida (F.), Mered (C.), et Courjon (D.), *Microscope à double détection STOM-AFM: principe et résultats*, *Microsc. Microanal. Microstruct.* **5** (1995), 19–29.
- [Barchiesi et VanLabeke 93] Barchiesi (D.) et VanLabeke (D.), *Application of Mie scattering of evanescent waves to scanning tunneling optical microscope theory*, *J. Mod. Opt.* **40** (1993), 1239–1254.
- [Barchiesi et VanLabeke 95] Barchiesi (D.) et VanLabeke (D.), *A perturbative diffraction theory of a multilayer system: applications to near-field optical microscopy SNOM and STOM*, *Ultramicroscopy* **57** (1995), 196–203.
- [Barchiesi 98] Barchiesi (D.), *Pseudo modulation transfer function in reflection scanning near-field optical microscopy*, *Optic. Comm.* **154** (1998), 167–172.

- [Berguiga 01] Berguiga (Lotfi), *Etude et réalisation d'un microscope de champ proche optique avec asservissement de type "shear force". Application à l'étude en champ proche du vieillissement de fibre optiques*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, Juillet 2001.
- [Berntsen *et al.* 93] Berntsen (S.), Bozhevolnaya (E.), et Bozhevolnyi (S.), *Macroscopic self-consistent model for external-reflection near-field microscopy*, J. Opt. Soc. Am. B **10** (1993), 878.
- [Bethe 44] Bethe (H. A.), *Theory of diffraction by small holes*, Phys. Rev. **66** (1944), 163–182.
- [Betzig *et al.* 87] Betzig (E.), Isaacson (M.), et Lewis (A.), *Collection mode near field scanning optical microscopy*, Appl. Phys. Lett. **51** (1987), 2088–2099.
- [Betzig et A. Lewis 86] Betzig (E.) et A. Lewis (M. Isaacson), A. Harootunian, *Near field optics scanning optical microscopy (NSOM): development and biophysical applications*, Biophys. J. **49** (1986), 269–279.
- [Betzig et Chichester 93] Betzig (E.) et Chichester (R. J.), *Single molecules observed by near-field scanning optical microscopy*, Science **262** (1993), 1422–1425.
- [Betzig et Trautman 92] Betzig (E.) et Trautman (J. K.), *Near-field optics: Microscopy, spectroscopy, and surface modification beyond the diffraction limit*, Science **257** (1992), 189–195.
- [Binning et Rohrer 84] Binning (G.) et Rohrer (H.), *Scanning tunneling microscopy*, Physica **127B** (1984), 37–45.
- [Born et Wolf 93] Born (M.) et Wolf (E.), *Principles of Optics*, 8 éd., Oxford, Pergamon, Press, Cambridge, 1993.
- [Bouhelier *et al.* 02] Bouhelier (A.), Renger (J.), Beversluis (M.), et Novotny (L.), *Plasmon-coupled tip-enhanced near-field optical microscopy*, Journal of Microscopy **210** (2002), 220–224.
- [Bouhelier *et al.* 03] Bouhelier (A.), Beversluis (M.), Hartschuh (A.), et Novotny (L.), *Near-Field Second-Harmonic Generation Induced by Local Field Enhancement*, Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 1–4.
- [Bouwkamp 50a] Bouwkamp (C. J.), *On Bethe's theory of diffraction by small holes*, Philips Research Reports **5** (1950), 321–332.
- [Bouwkamp 50b] Bouwkamp (C. J.), *On the diffraction of electromagnetic waves by small circular disks and holes*, Philips Research Reports **5** (1950), 401–422.
- [Bozhevolnyi *et al.* 94] Bozhevolnyi (S. I.), Keller (O.), et Smolyaninov (I. I.), *Phase conjugation of an optical near field*, Opt. Lett. **19** (1994), 1601.

- [Bozhevolnyi *et al.* 95] Bozhevolnyi (S. I.), Bozhevolnaya (E. A.), et Berntsen (S.), *Theoretical model for phase conjugation of optical near fields*, J. Opt. Soc. Am. A **12** (1995), 2645.
- [Bozhevolnyi et Bozhevolnaya 94] Bozhevolnyi (S. I.) et Bozhevolnaya (E. A.), *Extension of the macroscopic model for reflection near-field microscopy: regularization and image formation*, J. Opt. Soc. Am. A **11** (1994), 609.
- [Bozhevolnyi et Bozhevolnaya 99] Bozhevolnyi (S. I.) et Bozhevolnaya (E. A.), *Near-field imaging of the interference pattern of counterpropagating evanescent waves*, Opt. Lett. **24** (1999), 747.
- [Bozhevolnyi et Vohnsen 96] Bozhevolnyi (S. I.) et Vohnsen (B.), *Near-field optical holography*, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), 3351–3354.
- [Cadilhac 80] Cadilhac (M.), *Some mathematical aspects of the grating theory*, in *Electromagnetic Theory of Grating*, 1 éd., R. Petit ed, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [Carminati *et al.* 97] Carminati (R.), A. Madrazo (M. Nieto-Vesperinas), et Gref-fet (J.-J.), *Optical content and resolution of near-field optical images: influence of the operating mode*, J. Appl. Phys. **82** (1997), 501–509.
- [Carminati et Greffet 95a] Carminati (R.) et Greffet (J.-J.), *Influence of dielectric contrast and topography on the near field scattered by an inhomogeneous surface*, J. Opt. Soc. Am **12** (1995), 2716–2725.
- [Carminati et Greffet 95b] Carminati (R.) et Greffet (J.-J.), *Two-dimensional numerical simulation of the photon scanning tunneling microscope. Concept of transfer function*, Opt. Commun. **116** (1995), 316–321.
- [Carminati 96] Carminati (R.), *Analyse de la formation des images en optique de champ proche*, Thèse de doctorat, Ecole Centrale, Paris, Septembre 1996.
- [Castagne *et al.* 95] Castagne (M.), Prioleau (C.), et Fillard (J. P.), *Atomic force microscopy silicon tips as photon tunneling sensors: a resonant evanescent coupling experiment*, Appl. Opt. **34** (1995), 707.
- [Castiaux *et al.* 94] Castiaux (A.), Dereux (A.), Vigneron (JP.), Girard (C.), et Martin (O. J. F.), *Iterative scheme for computing exactly the total field propagating in dielectric structures of arbitrary shape*, J. Opt. Soc. Am. **11** (1994), 1073.
- [Chaumet *et al.* 98] Chaumet (P. C.), Rahmani (A.), de Fornel (F.), et Dufour (J.-P.), *Evanescent light scattering : The validity of the dipole approximation*, Phys. Rev. B **58** (1998), 2310–2315, 1998.

- [Christenssen 95] Christenssen (D. A.), *Analysis of near field tip patterns including object interaction using finite-difference time-domain calculations*, Ultramicroscopy **57** (1995), 189–195.
- [Cites *et al.* 92] Cites (J.), Sanghadasa (M. F. M.), Sung (C. C.), Reddick (R. C.), Warmack (R. J.), et Ferrell (T. L.), *Analysis of photon scanning tunneling microscope images*, J. Appl. Phys. **71** (1992), 7–10.
- [Courjon *et al.* 89] Courjon (D.), Sarayedine (K.), et Spajer (M.), *Scanning tunneling optical microscopy*, Opt. Commun. **71** (1989), 23–28.
- [Courjon *et al.* 90] Courjon (D.), Vigoureux (J. M.), Spajer (M.), et Sarayedine (K.), *External and internal reflection near-field microscopy : experiments and results*, Appl. Opt. **29** (1990), 3734–3740.
- [Courjon et Bainier 94] Courjon (D.) et Bainier (C.), *Near field microscopy and near field optics*, Rep. Prog. **54** (1994), 989.
- [Courjon et Bainier 01] Courjon (D.) et Bainier (C.), *Le champ proche optique: théorie et applications*, Springer, Springer, Paris, 2001.
- [Dazzi *et al.* 04] Dazzi (A.), Goumri-Said (S.), et Salomon (L.), *Theoretical Study of an absorbing sample in infrared near-field spectromicroscopy*, Optic. Comm **235** (2004), 351–360.
- [de Fornel *et al.* 89] de Fornel (F.), Goudonnet (J. P.), Salomon (L.), et Lesniewska (E.), *An evanescent field optical microscope*, Proc. SPIE **1139** (1989), 77–84.
- [de Fornel *et al.* 96] de Fornel (F.), Adam (P. M.), Salomon (L.), Goudonnet (J. P.), Santenac (A.), Carminatti (R.), et Greffet (J. J.), *Observation with a PSTM of a step on quartz surface. Analysis of the image formation*, J. Opt. Soc. Am. A **13** (1996), 35.
- [de Fornel 98] de Fornel (F.), *Les ondes évanescentes en optique et en optoélectronique*, cnet: collection technique et scientifique des télécommunications éd., E, Eyrolles, Paris, 1998.
- [Durig *et al.* 84] Durig (U.), Pohl (D.), et Rohver (F.), *Near-field optical scanning microscopy*, J. Appl. Phys. **59** (1984), 3318–3327.
- [Fillard *et al.* 95] Fillard (J. P.), Castagne (M.), et Prioleau (C.), *Optical properties of silicon-nitride atomic-force-microscopy tips in scanning tunneling optical microscopy: experimental study*, Appl. Opt. **34** (1995), 3737.
- [Fischer *et al.* 88] Fischer (U.), Dürig (U.), et Pohl (D.), *Near field optical scanning microscopy in reflection*, Appl. Phys. Lett. **52** (1988), 249–251.
- [Fischer *et al.* 89] Fischer (U.), Dürig (U.), et Pohl (D.), *Observation of single-particle plasmons by Near field optical microscopy*, Phys. Rev. Lett **62** (1989), 458–461.

- [Fischer 86] Fischer (U.), *Submicrometer aperture in a thin metal film as a probe of its microenvironment through enhanced light scattering and fluorescence*, J. Opt. Soc. Am. B **3** (1986), 3737–3742.
- [Fischer 93] Fischer (U.), *The tetrahedral tip as a probe for scanning near-field optical microscopy*, NATO ASI series, Kluwer, Dordrecht, 1993.
- [Furukawa et Kawata 98] Furukawa (H.) et Kawata (S.), *Local field enhancement with an apertureless near-field-microscope probe*, Opt. Comm. **148** (1998), 221–224.
- [Girard et Bouju 92] Girard (C.) et Bouju (X.), *Self-consistent study of dynamical and polarization effects in near-field optical microscopy*, J. Opt. Soc. Am. B **9** (1992), 298–305.
- [Girard et Courjon 90] Girard (C.) et Courjon (D.), *Model for scanning tunneling optical microscopy: a microscopic self-consistent approach*, Phys. Rev. B **42** (1990), 9340–9349.
- [Girard et Dereux 96] Girard (C.) et Dereux (A.), *Near-field theories*, Rep. Prog. Phys **59** (1996), 657.
- [Gleyzes *et al.* 95] Gleyzes (P.), Boccara (A. C.), et Bachelot (R.), *Near field optical microscopy using a metallic vibrating tip*, Ultramicroscopy **57** (1995), 318–322.
- [Goodman 68] Goodman (J.), *Introduction to Fourier Optics*, 1 éd., McGraw-Hill, New York, 1968.
- [Goudonnet *et al.* 95] Goudonnet (J. P.), Bourillot (E.), Adam (P. M.), de Fornel (F.), Salomon (L.), Vincent (P.), Nevriere (M.), et Ferrell (T. L.), *Differential theory of gratings: extension to deep gratings of arbitrary profile and permittivity through the R-matrix propagation algorithm*, J. Opt. Soc. Am. A **12** (1995), 1749.
- [Goumri-Said *et al.* 04a] Goumri-Said (S.), Salomon (L.), Dufour (J. P.), et Aourag (H.), *Numerical study of photolithography system: electromagnetic differential method*, Jou. Mat. Proc. Tech. **148** (2004), 50–56.
- [Goumri-Said *et al.* 04b] Goumri-Said (S.), Salomon (L.), Dufour (J. P.), de Fornel (F.), et Zayats (A. V.), *Numerical Simulations of Photon Scanning Tunneling Microscopy: the role of a probe tip geometry in the image formation.*, Optics. Comm. **in press** (2004).
- [Goumri-Said 03] Goumri-Said (éd.), *Numerical Study of 2D-PSTM: Differential theory and R-matrix algorithm*, International Conference on electromagnetic Near-Field characterization, Rouen. France, PROC. ICONIC, 2003.
- [Gérard 04] Gérard (Davy), *Etude en champ proche et en champ lointain de composants périodiquement nanostructurés : cristaux pho-*



- toniques et tamis à photons*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, France, Juillet 2004.
- [Greffet *et al.* 95] Greffet (J. J.), Sentenac (A.), et Carminati (R.), *Surface profile reconstruction using near-field data*, Opt. Comm. **116** (1995), 20–24.
- [Greffet et Carminati 97] Greffet (J. J.) et Carminati (R.), *Image formation in near-field optics*, Prog. Surf. Sci. **56** (1997), 133–237.
- [Greffet 89] Greffet (J. J.), *Scattering of s-polarized electromagnetic waves by a 2d obstacle near an interface*, Opt. Comm. **72** (1989), 274–278.
- [Gross *et al.* 01] Gross (N.), Dazzi (A.), Ortega (J.M.), Andouart (R.), Prazeres (R.), Chicanne (C.), Goudonnet (J.-P.), Y.Lacroute, Boussard (C.), Fonteneau (G.), et Hocdé (S.), *Infrared near-field study of a localized absorption in a thin film*, EPJ-AP **16** (2001), 91.
- [Harrington 93] Harrington (R.), *Field computation by moment methods*, IEEE Press (1993).
- [Hatano *et al.* 97] Hatano (H.), Inouye (Y.), et Kawata (S.), *Near-field optical microscopy with a multiheight scanning imaging mode*, Appl.Opt **22** (1997), 1532.
- [Hecht *et al.* 95] Hecht (B.), Heinzelmann (H.), et Pohl (D.), *Comined apertre SNOM/PSTM: best of the both worlds ?*, Ultramicroscopy **57** (1995), 228–234.
- [Hecht *et al.* 00] Hecht (B.), Sick (B.), Wild (U.P.), Deckert (V.), Zenobi (R.), Martin (O.J.F.), et Pohl (D.W.), *Scanning near-field optical microscopy with aperture probes: Fundamentals and applications*, J. Chem. Phys. **112** (2000), 7761–7774.
- [Hulst *et al.* 93] Hulst (N. Van), Moers (M.), et Bolger (B.), *Near-field optical microscopy in transmission and reflexions modes and combination with force microscopy*, J. Microsc. **171** (1993), 95–105.
- [Inouye et Kawata 94] Inouye (Y.) et Kawata (S.), *Near field optical microscopy with a metallic probe tip*, Opt. lett. **19** (1994), 159–161.
- [Kann *et al.* 95a] Kann (J.L.), Milster (T. D.), Froehlich (F. F.), Ziolkowski (R. W.), et Judkins (J. B.), *Near-field optical detection of asperities in dielectric surfaces*, J.Opt. Soc. Am. A **12** (1995), 501.
- [Kann *et al.* 95b] Kann (J.L.), Milster (Tom D.), Froehlich (F. F.), Ziolkowski (R. W.), et Judkins (J. B.), *Linear behavior of a near-field optical scanning system*, J.Opt. Soc. Am. A **12** (1995), 1677.
- [Kapany et Burke 72] Kapany (N. S.) et Burke (J. J.), *Optical waveguides*, Academic Press, New York and London, 1972.

- [Kawata *et al.* 94] Kawata (S.), Inouye (Y.), et Sugiura (T.), *Near-Field Scanning Optical Microscope with a Laser Trapped Probe*, Jpn. J. Appl. Phys. **33** (1994), L1725–L1727.
- [Kelso *et al.* 01] Kelso (C.M.), Flammer (P. David), DeSanto (J. A.), et Collins (R. T.), *Integral equations applied to wave propagation in two dimensions: modeling the tip of a near-field scanning optical microscope*, J. Opt. Soc. Am. A **18** (2001), 1993.
- [Koglin *et al.* 96] Koglin (J.), Fischer (U.), et Fuchs (H.), *Scanning near-field optical microscopy with a tetrahedral tip at a resolution with a near field probe*, Journal of Biomedical Optics **1** (1996), 75–78.
- [Labani *et al.* 90] Labani (B.), Girard (C.), Courjon (D.), et VanLabeke (D.), *Optical interaction between a dielectric tip and a nanometric lattice: implication for near-field microscopy*, J. Opt. Soc. Am. B **7** (1990), 936–943.
- [Lewis *et al.* 84] Lewis (A.), Isaacson (M.), Harootunian (A.), et Muray (A.), *Development of a 500 Å resolution light microscope*, Ultramicroscopy **13** (1984), 227–231.
- [Li 96] Li (L.), *Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures*, J. Opt. Soc. Am. A **13** (1996), 1870.
- [Li 01] Li (L.), *Mathematical Reflections on the Fourier Modal Method in grating theory (chapter5)*, 1 éd., G. Bao, Lawrence Cowsar and Wen masters, SIAM, 2001.
- [Madrazo et NietoVesperinas 95] Madrazo (A.) et NietoVesperinas (M.), *Detection of sub-wavelength Goos-Hanchen shifts from near-field intensities: a numerical simulation*, Opt. Lett. **20** (1995), 2445.
- [Maheswari *et al.* 96] Maheswari (R. Uma), Kadono (H.), et Ohtsu (M.), *Power spectral analysis for evaluating optical near-field images of 20 nm gold particles*, Optic. Comm. **131** (1996), 133–142.
- [Marshall 85] Marshall (G. F.) (éd.), *Thin films and gratings theories used to optimize the high reflectivity of mirrors and gratings for X-ray optics, in applications of thin films multilayered structures to figured X-ray optics*, PROC. Photo-Opt. Instrum. Eng. 563, 1985.
- [Martin *et al.* 94] Martin (O. J. F.), Dereux (Alain), et Girard (Christian), *Iterative scheme for computing exactly the total field propagating in dielectric structures of arbitrary shape*, J. Opt. Soc. Am. A **11** (1994), 1073.
- [Martin 94] Martin (O. J. F.), *A numerical Green's function approach to investigate vectorial field-matter*, Ph.D. thesis, EPFL, Zurich, Switzerland, 1994.

- [Mie 08] Mie (G.), *Beiträge zur optik trüber Medien speziell kolloidaler Metallösungen*, Ann. Phys. IV **25** (1908), 377.
- [Montiel 98] Montiel (F.), *Waveguide confinement of Cerenkov second-harmonic generation through a graded-index grating coupler: electromagnetic optimization*, J. Mod. Opt. **45** (1998), 2169–2186.
- [M.Totzeck et Krumbugel 94] M.Totzeck et Krumbugel (M.), *Lateral resolution in the near field and far field phase images of  $\pi$ -phaseshifting structures.*, Optic. Comm. **112** (1994), 189–200.
- [M.Totzeck et Krumbugel 95] M.Totzeck et Krumbugel (M.), *Test of various diffraction theories in the near-field of phase objects.*, Ultramicroscopy **57** (1995), 160–164.
- [Naya et al. 97] Naya (M.), Micheletto (R.), Monobe (S.), Maherswari (R. Uma), et Ohtsu (M.), *Near-field optical imaging of flagellar filaments of salmonella in water with optical feedback control*, Appl.Opt **36** (1997), 1681–1683.
- [Nevière et al. 71] Nevière (M.), Cerutti-Maori (G.), et Cadilhac (M.), *Sur Une Nouvelle Methode De Resolution Du Probleme De La Diffraction D'une Onde Plane Par Un Réseau Infiniment Conducteur*, Opt. Comm. **3** (1971), 48–52.
- [Nevière et al. 74a] Nevière (M.), Vientent (P.), et petit (R.), *Sur la théorie du réseau conducteur et ses applications à l'optique*, Nouv. Rev. Opt. **5** (1974), 65–77.
- [Nevière et al. 74b] Nevière (M.), Vincent (P.), et Petit (R.), *Sur la théorie du réseau conducteur et ses applications à l'optique.*, Nouv. Rev. Opt. **5** (1974), 65–77.
- [Nevière et Popov 03] Nevière (M.) et Popov (E.), *Light propagation in periodic media, Differential theory and design*, 1 éd., Brian J. Thompson ed, Marcel Dekker, New York, 2003.
- [Nevière 91] Nevière (M.), *Multilayer coated gratings for x-ray diffraction: differential theory*, J. Opt. Soc. Am. A **8** (1991), 1468.
- [Novotny et al. 94] Novotny (L.), Pohl (D. W.), et Regli (P.), *Light propagation through nanometer-sized structures: the two-dimensional-aperture scanning near-field optical microscope*, J. Opt. Soc. Am. **11** (1994), 1768.
- [Novotny et al. 95] Novotny (L.), Pohl (D. W.), et Regli (P.), *Near-field, far-field and imaging properties of the 2D aperture SNOM*, Ultramicroscopy **57** (1995), 180–188.

- [Ohtsu et Kobayashi 04] Ohtsu (M.) et Kobayashi (K.), *Optical Near fields : Introduction to classical and quantum theories of the electromagnetic phenomena at the nanoscale*, 1 éd., Springer, Japan, 2004.
- [Palik 85] Palik (E. D.) (éd.), *Handbook of Optical Constants of Solids*, New York, Academic, 1985.
- [Parent et al. 01] Parent (G.), VanLabeke (D.), et Baida (F.), *Surface imaging in near-field optical microscopy by using the fluorescence decay rate: a theoretical study*, *J. Microscopy* **202** (2001), 296.
- [Petit 66] Petit (R.), *Contribution à l'étude de la diffraction par un réseau métallique*, *Rev. Opt.* **45** (1966), 249–276.
- [Petit 80] Petit (R.), *A tutorial introduction, in Electromagnetic Theory of Grating*, 1 éd., R. Petit ed, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [Piednoir et al. 95] Piednoir (A.), F.Creuset, Licoppe (C.), et Ortega (J. M.), *Locally resolved infrared spectroscopy*, *Optic. Comm* **57** (1995), 282–286.
- [Piednoir et al. 96] Piednoir (A.), Licoppe (C.), et F.Creuset, *Imaging and local infrared spectroscopy with near-field optical microscope*, *Optic. Comm* **129** (1996), 414–422.
- [Pieralli 94] Pieralli (C.), *Statistical estimation of point spread function applied to scanning near-field optical microscopy*, *Optic. Comm.* **108** (1994), 203–208.
- [Pohl et al. 84] Pohl (D.), Denk (W.), et Lanz (M.), *Optical stethscopy : image recording with resolution  $\lambda/20$* , *Appl. Phys. Lett.* **44** (1984), 651–653.
- [Pohl et Courjon 93] Pohl (D.) et Courjon (D.), *Near-field Optic and related techniques*, 2 éd., Kluwer, Dordrecht, The netherlands, 1993.
- [Pohl 92] Pohl (D. W.), *Nano-optics and scanning near-field optical microscopy*, *Scanning Tunneling Microscopy* **2** (1992), 233–271.
- [Rahmani et de Fornel 96] Rahmani (A.) et de Fornel (F.), *Near-field optical probing of fluorescent microspheres using a photon scanning tunneling microscope*, *Opt. Commun.* **131** (1996), 253–259.
- [Rayleigh 07] Rayleigh (O. M. Lord), *On the dynamical theory of gratings*, *Proc. Royal. Soc. London* **A79** (1907), 399–416.
- [Reddick et al. 89] Reddick (R.), Warmack (R.), et Ferrel (T.), *New form of scanning optical microscopy*, *Phys. Rev. B.* **39** (1989), 767–770.
- [Roberts 87] Roberts (A.), *Electromagnetic theory of diffraction by a circular aperture in a thick perfectly conducting screen*, *J. Opt. Soc. Am.* **4** (1987), 1907–1983.
- [Roberts 91] Roberts (A.), *Small-hole coupling of radiation into a near-field probe*, *J. Appl. Phys.* **70** (1991), 4045–4049.

- [Salomon *et al.* 91] Salomon (L.), de Fornel (F.), et Goudonnet (J. P.), *Sample-tip coupling efficiencies of the photon-scanning tunneling microscope*, J.Opt. Soc. Am. A **8** (1991), 2009.
- [Salomon *et al.* 00] Salomon (L.), Charbonnier (C.), de Fornel (F.), Adam (P. M.), Guérin (P.), et Carcenac (F.), *Near-field optical study of mesoscopic Au periodic samples: Effect of the polarization and comparison between different imaging modes*, Phys. Rev. B **62** (2000), 17072–17083.
- [Salomon 91] Salomon (L.), *Théorie et mise au point d'un microscope à effet tunnel photonique*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, 1991.
- [Salomon 92] Salomon (L.), *Etude théorique et expérimentale de la profondeur de pénétration du champ frustré dans un microscope à effet tunnel photonique*, J. Optics **23** (1992), 49–55.
- [Schaafsma *et al.* 99] Schaafsma (D.T.), Mossadegh (R.), Sanghera (J.S.), Aggarwal (I.D.), Gilligan (J.M.), Tolk (N.H.), Luce (M.), Generosi (R.), Perfetti (P.), Cricenti (A.), et Margaritondo (G.), *Singlemode chalcogenide fiber infrared SNOM probes*, Ultramicroscopy **77** (1999), 77–88.
- [Sheridan et Sheppard 93] Sheridan (J. T.) et Sheppard (C. J. R.), *Coherent imaging of periodic thick fine isolated structures*, J.Opt. Soc. Am. A **10** (1993), 614.
- [Spajer *et al.* 91] Spajer (M.), Courjon (D.), Sarayedine (K.), Jalocho (K.), et Vigoureux (J.-M.), *Microscopie en champ proche par réflexion.*, J. Phys. III **1** (1991), 1–12.
- [Synge 28] Synge (E.), *A suggested method for extending microscopic resolution into the ultra-microscopic region*, Philos. Mag. **6** (1928), 356.
- [Talley *et al.* 00] Talley (D.B.), Shaw (L.B.), Sanghera (J.S.), Aggarwal (I.D.), Cricenti (A.), Generosi (R.), Luce (M.), Margaritondo (G.), Gilligan (J.M.), et Tolk (N.H.), *Scanning near field infrared microscopy using chalcogenide fiber tips*, Materials Letters **42** (2000), 339–344.
- [Tanaka *et al.* 98a] Tanaka (K.), M.Masahiro , et Katayama (K.), *Simulations of two-dimensional Photon Scanning tunneling microscope by Boundary integral equation Method: p-polarization*, J.Opt. Soc. Am. A **7** (1998), 1918.
- [Tanaka *et al.* 98b] Tanaka (K.), M.Masahiro , et Omoyas (T.), *Boundary integral equations for a two-dimensional simulator of Photon Scanning tunneling microscope*, J.Opt. Soc. Am. A **7** (1998), 1918.

- [Tanaka et Tanaka 98] Tanaka (M.) et Tanaka (K.), *Boundary integral equations for a computer aided-design and simulations of near-field optics: two-dimensional optical manipulator*, J.Opt. Soc. Am. A **15** (1998), 101.
- [Toldeo-Crow et al. 92] Toldeo-Crow (R.), Yang (P.), Chen (Y.), et Vaez-Irvani (M.), *Near-field differential scanning optical microscope with atomic force regulation*, Appl. Phys. Lett. **60** (1992), 2957–2959.
- [Trautman et al. 94] Trautman (J. K.), J. J. Macklin (L. E. Brus), et Betzig (E.), *Near-field spectroscopy of single molecules at room temperature*, Nature **369** (1994), 40–42.
- [Ulrich et Prettl 73] Ulrich (R.) et Prettl (W.), *Planar leaky light-guides and couplers*, Appl. Phys. **1** (1973), 55–68.
- [VanLabeke et al. 95] VanLabeke (D.), Barchiesi (D.), et Baida (F.), *Optical characterization of nanosources used in scanning near-field optical microscopy*, J.Opt. Soc. Am. A **12** (1995), 695.
- [VanLabeke et Barchiesi 92] VanLabeke (D.) et Barchiesi (D.), *Scanning-tunneling optical microscopy: a theoretical macroscopic approach*, J. Opt. Soc. Am. A. **9** (1992), 732.
- [VanLabeke et Barchiesi 93] VanLabeke (D.) et Barchiesi (D.), *Probes for scanning tunneling optical microscopy: a theoretical comparison*, J.Opt. Soc. Am. A **10** (1993), 2193.
- [Wang et al. 04] Wang (Xueen), Fan (Zhaozhong), et Tang (Tiantong), *Study on the power transmission and light spot size of optical probes in scanning near field optical microscopes*, Optic. Comm. **235** (2004), 31.
- [Weeber et al. 96] Weeber (J. C.), de Fornel (F.), et Goudonnet (J. P.), *Computation of the field diffracted by a local surface defect: application to tip-sample interaction in the photon scanning tunneling microscope*, J.Opt. Soc. Am. A **13** (1996), 944.
- [Wolf et Nieto-Vespirinas 85] Wolf (E.) et Nieto-Vespirinas (M. J.), *Analyticity of the angular spectrum amplitude of scattered fields and some of its consequence*, J. Opt. Soc. Am. A. **2** (1985), 886–890.
- [Zenhausern et al. 94] Zenhausern (F.), Martin (Y.), et Wickramasinghe (H.), *Scanning interferometric apertureless microscopy : optical imaging at 10 ngstrom resolution*, Science **269** (1994), 1083–1085.

## Résumé :

Ce travail est relatif à la contribution d'un modèle théorique pour représenter un PSTM. L'approche est globale et veut pouvoir prendre en considération des objets de tailles inférieures à la longueur d'onde mis en présence de sondes de tailles réalistes. Le modèle développé est bi-dimensionnel et dans cette thèse son application est limité à la polarisation S (TE) en diffraction normale et à hauteur constante.

Nous exposons d'abord les bases du modèle mis en œuvre qui repose sur la méthode différentielle à laquelle sont combinés des algorithmes matriciels. Pour éviter tout problème numérique lorsque le système sonde-objet a des dimensions réalistes (beaucoup supérieure à la longueur d'onde) nous avons utilisé l'algorithme matriciel S. Après avoir défini les critères à satisfaire strictement pour obtenir des performances sûres nous avons appliqué ce modèle aux différents cas suivant :

- Sonde monomodes
- Sondes multimodes
- Sondes structurées (gaine, cœur et éventuellement revêtement métallique externe sont pris en compte).
- Spectroscopie d'un objet absorbant inséré dans un couche diélectrique uniforme en proche IR.

Tous nos résultats sont cohérents et ouvrent des voies sûres pour l'interprétation des images puisque nous avons montrés que nos calculs étaient en accord qualitatif correct avec des résultats expérimentaux obtenus antérieurement sur des systèmes tests. Dans tous les cas étudiés nous avons montré que la présence de la sonde, quelle que soit sa nature et sa structure, perturbait la distribution du champ électromagnétique rayonné par l'objet. Ceci nous conduit à définir une nouvelles approche de la fonction de transfert en microscopie de champ proche. L'étude encore limitée aux sondes monomodes, montre que la fonction de transfert n'est pas définie dans le cas général.

Ce premier travail ouvre des perspectives intéressantes puisque pour la première fois des sondes de formes réelles (incluant apex et taper) et de grandes tailles (jusqu'à 70 $\mu\text{m}$  pour la partie guidante) éventuellement métallisées, ont été prises en compte dans un modèle numérique. Il permet aussi d'aborder de façon nouvelle le problème de la fonction de transfert et des images spectroscopiques, y compris en IR. Il est aussi adaptable à la polarisation P (TM)

**Mot clés :** Optique de champ proche, Microscope à effet Tunnel Photonique (PSTM), Images optiques, Couplage sonde-objet, Méthode différentielle et Algorithmes matriciels.