

Titre: Coupleurs fibres-métasurfaces aux fréquences THz
Title:

Auteur: Martin Girard
Author:

Date: 2014

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Girard, M. (2014). Coupleurs fibres-métasurfaces aux fréquences THz [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/1426/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1426/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Maksim A. Skorobogatiy
Advisors:

Programme: Génie physique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

COUPLEURS FIBRES - MÉTASURFACES AUX FRÉQUENCES THZ

MARTIN GIRARD
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)
MAI 2014

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

COUPLEURS FIBRES - MÉTASURFACES AUX FRÉQUENCES THZ

présenté par : GIRARD Martin

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. FRANCOEUR Sébastien, Ph.D., président

M. SKOROBOGATIY Maksim A., Ph.D., membre et directeur de recherche

M. CALUZ Christophe, Ph.D., membre

À mes parents.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier plusieurs personnes m'ayant aidé dans ma recherche ainsi que durant la rédaction de ce mémoire.

Tout d'abord, merci à Maksim Skorobogatiy pour m'avoir accepté dans son groupe de recherche et épaulé durant mes recherches, avec des conseils et discussions très utiles.

Merci à tous les membres du laboratoire pour m'avoir enduré et pour toutes les discussions. Une mention spéciale pour Andrey Markov qui a effectué les mesures du chapitre 5

Merci à mes parents et amis pour m'avoir supporté durant les années d'études à polytechnique. Une mention spéciale à Maxime Gilbert pour la correction du français des chapitres 1 et 2.

Également, un remerciement pour les membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce mémoire malgré leurs horaires chargés.

Je tiens également à remercier le CRSNG du soutien financier qui m'a été accordé durant la seconde année de maîtrise.

RÉSUMÉ

Les métamatériaux sont une classe de matériaux artificiels dont les propriétés électromagnétiques peuvent être choisies lors de la conception. Les capacités démontrées sont très variées, allant de filtres fréquentiels à l'augmentation des effets quantiques tels que l'effet Hall de spin du photon. Bien que ces matériaux soient théoriquement maîtrisés, leur fabrication est beaucoup plus problématique. On considère que les éléments des métamatériaux doivent être en dessous de la limite des matériaux effectifs ($\Lambda < \lambda/10$). De plus, il est difficile d'assembler une structure périodique en 3 dimensions si les éléments sont petits. Pour ces raisons, les métamatériaux sont généralement imprimés sur une surface, en 2 dimensions, que l'on appelle métasurfaces ; on produit ces métasurfaces généralement pour les fréquences THz ($\sim 10^{12}$ Hz) ou plus bas puisque la longueur d'onde est suffisamment large pour rendre aisée la fabrication.

Les fréquences THz auxquelles sont produits ces métasurfaces ont également plusieurs problèmes. L'absorption dans la plupart des matériaux traditionnels est relativement large (par exemple, le BK7 a des pertes de 20 dB / cm) et les puissances fournies par les sources sont relativement faibles (100 μ W pour une source de spectroscopie THz dans le domaine du temps (THz-TDS) standard). Ces métasurfaces peuvent donc jouer un rôle important en remplaçant une large partie des matériaux manquants. De plus, les propriétés résonantes de ces matériaux peuvent être utilisées pour fabriquer des senseurs et autres dispositifs importants. Un problème majeur avec l'implémentation de ceux-ci est le fait qu'ils sont toujours utilisés avec un faisceau libre et non un guide d'onde. Une géométrie simple pour implémenter un guide d'onde est d'utiliser un coupleur standard où un guide est placé au-dessus de la métasurface.

Plusieurs articles sur les métasurfaces font une analyse en termes de paramètres effectifs, sans porter d'attention particulière à l'angle d'incidence sur la surface. Or, force est de constater qu'une large partie des publications récentes sur le sujet montrent que ce critère est loin d'être respecté et que la permittivité est une fonction de l'angle d'incidence ; ceci a une influence immense sur les propriétés d'un coupleur bâti à l'aide d'un tel matériau. Premièrement, la modélisation ne s'effectue plus en deux dimensions, avec une expression simple de la permittivité pour la métasurface. Deuxièmement, le couplage contra-directionnel devient possible puisque la périodicité s'approche du vecteur d'onde. Ce mémoire présente la modélisation d'un coupleur fibre-métasurface tenant compte de ces problèmes. Celui-ci présente

deux articles publiés.

Le premier article modélise un coupleur basé sur une fibre sous-longueur d'onde de $400\text{ }\mu\text{m}$ de diamètres avec une métasurface constituée de résonateurs à anneaux coupés (SRR) sur un substrat de verre de silice pur de $700\text{ }\mu\text{m}$ d'épais, à des fréquences avoisinant 300 GHz ($\lambda = 1000\text{ }\mu\text{m}$). On note quelques résultats importants. Premièrement, le système présente un grand nombre de résonances ayant des bandes passantes faibles ($\sim 1.5\text{ GHz}$) et non une seule résonance large, telle qu'observée à incidence normale. Ces résonances sont constituées d'une partie localisée dans le SRR ainsi qu'une partie dans le substrat. Deuxièmement, les paramètres de ces résonances sont une fonction de la distance fibre-métasurface. Troisièmement, on observe que l'on peut déterminer facilement la position spectrale de celles-ci à l'aide d'un diagramme de bande.

Le second article modélise un senseur destiné à l'industrie du papier. La géométrie est très semblable à celle du premier article avec deux différences importantes. L'épaisseur du substrat a été réduite à $320\text{ }\mu\text{m}$ afin de limiter le nombre de modes dans le système et une couche de papier d'épaisseur variable a été rajoutée sur le substrat. Puisque les résonances sont constituées en partie de modes de substrats, les paramètres des résonances changent avec la permittivité du papier. La position spectrale de la résonance est liée à l'épaisseur de la couche de papier et l'amplitude de la réflexion est liée à la partie imaginaire de la permittivité. Afin de relier la permittivité à la teneur en eau du papier, on utilise un modèle effectif de Clausius-Mossotti. Si l'on considère que les pertes dans la fibre et le substrat sont négligeables par rapport à celles dans le papier, on obtient des limites de détection de $10\text{ }\mu\text{m}$ pour l'épaisseur et de $0.02\text{ \% V/V}$ pour la teneur en eau.

ABSTRACT

Metamaterials are a class of artificial materials where the electromagnetic properties can be tailored during the design process. Currently demonstrated properties are varied, ranging from frequency filters to enhancement of quantum effects such as photon spin Hall effect. While these materials are mastered from a theoretical point of view, their fabrication is much more complicated. It is generally accepted that metamaterial elements must be under the effective medium limit ($\Lambda < \lambda/10$). Moreover, assembly of a 3D periodical system becomes much more complicated for small elements. For this reason, metamaterials are usually printed in 2D, on a surface, which are called metasurfaces. Generally, these are produced for the THz frequencies ($\sim 10^{12}$ Hz) or lower to have a large wavelength and thus easy fabrication.

Working at THz frequencies also carries additional problems. Absorption in traditional optical mediums is typically large (for example, BK7 glass has losses of 20 dB / cm) and powers supplied by THz sources are generally weak ($100 \mu\text{W}$ for a THz-TDS standard source). Metasurfaces can thus play an important role by replacing traditional mediums. Moreover, we can use the resonant properties of metamaterials to produce sensors and other devices. Currently, the metasurfaces are used in conjunction with a free-space beam instead of a typical waveguide, which may be problematic when implementing devices. A simple solution to this problem is to use the metamaterial as a standard coupler by placing a waveguide above the metasurface.

As stated before, we generally consider metasurfaces as effective mediums, where the permittivity is insensitive to the angle of the incident beam. However, a large amount of publications on this subject shows that this is not respected. This can have a huge impact on properties of a coupler based on such a material. First, modelisation is not a simple 2D mode calculation with a simple expression for permittivity. Second, contra-directional coupling becomes permitted due to wavevector becoming close to the periodicity. This work shows modelisation of such a fiber-metasurface coupler while taking account of these problems, with two publications on the subject.

The first article models the coupler using a $400 \mu\text{m}$ diameter subwavelength step-index fiber coupled to a metasurface made of SRR on a $700 \mu\text{m}$ thick fused silica substrate. Frequencies are around 300 GHz ($\lambda = 1000 \mu\text{m}$). We obtain some interesting results. First, the system shows a large number of fine resonances (~ 1.5 GHz) instead of a single large

resonance which would be typically seen on such a metasurface. These are constituted of a both a SRR-bound field and a propagative substrate mode. Second, these resonances are strongly influenced by the fiber-metasurface distance. Third, the spectral position can be easily calculated using a band diagram since they are located at Van Hove singularities.

The second article treats of a paper sensor based on such a device. The geometry used is the same as in the first article, except for two differences. First, the substrate thickness has been reduced to $320\text{ }\mu\text{m}$ to lower the amount of substrate modes available. Second, a paper layer was added underneath the substrate. Since the resonances are a mixture of SRR-bound and substrate modes, resonance parameters change with paper properties. The spectral position can be related to paper thickness and real part of the permittivity while the reflectance amplitude is related to the imaginary part of the permittivity. A Clausius-Mossotti model is used to link the imaginary part of ϵ to the water content. Assuming negligible losses for the fiber and substrate, we obtain limit of detections of $10\text{ }\mu\text{m}$ of paper thickness change and $0.02\text{ }\%$ V/V for the water content.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xvi
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Cristaux photoniques et métamatériaux	1
1.2 Éléments de la problématique	2
1.3 Objectifs de recherche	3
1.4 Plan du mémoire	4
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	6
2.1 Électromagnétisme, guides d'ondes et cristaux photoniques THz	6
2.1.1 Équations de Maxwell	6
2.1.2 Périodicité et théorème de Bloch	7
2.1.3 Guides d'onde THz	9
2.2 Métamatériaux vs cristaux photoniques	10
2.2.1 Milieux effectifs	11
2.2.2 Validité des milieux effectifs et considérations angulaires	12
2.2.3 Comportement fréquentiel	12
2.3 Systèmes multirésonants	13
2.3.1 Résonances de Fano, transparence induite, et leurs relations	18
2.3.2 Systèmes à pertes	19
2.4 Senseurs	20
2.4.1 Objectifs et métriques	20
2.4.2 Méthodes basées sur l'optique guidée	21

2.4.3 Méthodes basées sur les métasurfaces	22
2.5 Méthode des éléments finis	23
CHAPITRE 3 Article 1. Probing terahertz metamaterials with subwavelength optical fibers	25
3.1 Authors	25
3.2 Abstract	25
3.3 Introduction	25
3.4 Geometry of a fiber-metamaterial coupler	28
3.5 Band diagram of the fiber-metamaterial coupler	30
3.6 Scattering theory	31
3.7 Convergence of a supercell approximation	36
3.8 Effect of the fiber-metamaterial separation on transmission spectrum	38
3.9 Effect of the fiber-material coupling length on transmission spectrum	41
3.10 Resonance engineering using band diagram calculations	44
3.11 Conclusion	45
3.12 Acknowledgments	46
CHAPITRE 4 Article 2. Integrated terahertz multiparameter sensors using fiber/frequency selective surface couplers	47
4.1 Authors	47
4.2 Abstract	47
4.3 Introduction	47
4.4 Device Geometry	50
4.5 Fiber transmission and reflection spectra	50
4.6 Band diagram versus S-parameter simulations	54
4.7 Conclusions	57
CHAPITRE 5 ASPECTS MÉTHODOLOGIQUES ET DISCUSSION GÉNÉRALE	60
5.1 Convergence des simulations	60
5.2 Erreurs de modélisation	62
5.3 Mesures Expérimentales	64
CHAPITRE 6 CONCLUSIONS	66
6.1 Synthèse des travaux	66
6.2 Limitations de la solution proposée	67
6.3 Améliorations futures	67

RÉFÉRENCES	69
----------------------	----

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Brisure de symétrie engendrée par l'ajout de la fibre	3
Figure 1.2	a) 3D rendering of a subwavelength THz fiber interrogating a frequency selective surface featuring 6 periods in the longitudinal direction and 3 periods in the transversal direction. Test film is placed in contact with the flat part of a substrate. b) Side view, c) top view of the unit cell that corresponds to a) and that we use in the band diagram calculations.	4
Figure 2.1	Illustration d'un système à 2 ports avec les diverses composantes de $ S_+\rangle$ et $ S_-\rangle$ indiquées. Le cercle représente un résonateur.	15
Figure 2.2	Paramètre $ \bar{S}_{21} $ calculé avec 2.27 pour différents r, t	15
Figure 2.3	Validité de l'approximation faite par (2.32) pour $\omega_1 = 0$, $\omega_2 = 1.25$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 0.25$, en bleu le résultat exact, en magenta l'approximation avec les mêmes paramètres, en or l'approximation par $\omega_1 = 0.25$, $\omega_2 = 1$, $\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = -0.6$	17
Figure 3.1	Schematic of a unit cell used in simulations. a) side view, b) top view. Unless stated otherwise $R = 200 \mu\text{m}$, $h = 50 \mu\text{m}$, $\Lambda = 400 \mu\text{m}$, $\theta = 30^\circ$, $w = 15 \mu\text{m}$ and $r = 90 \mu\text{m}$. c) 3D rendering of a fiber-FSS system featuring 3 transverse and 6 longitudinal periods. d) Linearly polarized (along $\mathbf{z}$) fundamental HE_{11} mode of a single mode fiber is used as a port condition.	29
Figure 3.2	Band diagrams for a) fiber-slab system without SRRs, b) fiber-metamaterial system with SRRs. Polarization of some of the modes is indicated as $\mathbf{x}$, or $\mathbf{z}$ depending on the leading component of the electric field. Color for each optical state indicates the degree of field localization in the fiber core region.	32
Figure 3.3	(a) 3D rendering of a supercell used in simulation with $N_t = 9$ SRRs in the transverse direction and a single period in the longitudinal direction. (b) Transmission through supercells of different width, $N_t = 3$ (blue), $N_t = 9$ (yellow) and $N_t = 15$ (black)	37
Figure 3.4	Transmission through supercells of different width $N_t = 9$ (yellow) and $N_t = 15$ (black) for different values of the substrate material loss (a) no loss, (b) $\text{Im}(\epsilon) = 0.02i$, and (c) $\text{Im}(\epsilon) = 0.2i$	38

Figure 3.5	Transmission through a fiber-metamaterial system $N_t = 3$, $N_l = 1$, for various fiber-metamaterial separations $H = 10 \mu m$ (blue), $H = 50 \mu m$ (red), $H = 90 \mu m$ (green) and $H = 130 \mu m$ (yellow).	39
Figure 3.6	(a) Changes in the transmission peak located at ~ 240 GHz as a function of the fiber-metamaterial separation H . (b) Changes in the peak position (zero transmission) and peak width are fitted very well with exponential dependence on H . (c) Electric field distribution at the frequency of zero transmission, and (d) at the frequency of maximal transmission	41
Figure 3.7	Fiber transmission spectrum for fiber-metamaterial system with $N_l = 10$ periods. Dotted vertical lines indicate spectral position of the Van Hove singularities as found from Fig. 3.2(b).	43
Figure 3.8	Fiber transmission spectra for various numbers of SRR periods in the fiber-metamaterial coupler in the vicinity of a peak at 249 GHz : (a) $N_l = 1 - 7$. (b) $N_l = 8 - 11$. Circles indicate numerical calculations, while solid lines are analytical fits using a single Fano line shape (3.14). (Exceptionally, data for $N_l = 10$ is fitted using two Fano resonances).	44
Figure 3.9	Peak amplitude a (blue), peak bandwidth Γ_Φ (red), and peak asymmetry q (green) obtained from fitting the resonant line shape near 249 GHz (see Fig. 3.8) with Fano line shape.	45
Figure 4.1	a) 3D rendering of a subwavelength THz fiber interrogating a frequency selective surface featuring 6 periods in the longitudinal direction and 3 periods in the transversal direction. Test film is placed in contact with the flat part of a substrate. b) Side view, c) top view of the unit cell that corresponds to a) and that we use in the band diagram calculations.	51
Figure 4.2	a) Transmission through a subwavelength fiber coupled to a single cell of a FSS for various values of the paper thickness $t = 50 \mu m$ (black), $100 \mu m$ (blue), $150 \mu m$ (red). b) For the peak near 350 GHz, dependence of the peak parameters on the paper thickness.	52
Figure 4.3	a) Fiber reflection spectra for different values of the water content (by volume) $w = 0.85\%$, $\epsilon'' = 0.01$ (blue); $w = 2.5\%$, $\epsilon'' = 0.03$ (green); $w = 4.1\%$, $\epsilon'' = 0.05$ (red). b) Value of the maximal reflection for four different resonances, I (solid), II (dashed), III (dotted), IV (dash-dotted), as a function of ϵ'' (paper thickness is fixed and equals to $50 \mu m$).	53

Figure 4.4	Interrogation of a longer section of FSS (10 periods) with a subwavelength fiber. a) Transmission spectrum, b) reflection spectrum, and c) losses (1-R-T).	55
Figure 4.5	Spectral change in the peak positions for different values of paper thickness. Presented data is for resonances I (blue), II (green), III (red), IV (cyan), V (purple), VI (yellow), VII (black). In solid curves – results of the band diagram calculations, in dashed curves – results of the S-parameter calculation VI (dot-dashed) and VII (dashed). b) Band diagrams of the optical states for an infinite fiber / FSS system for various values of paper thicknesses of 15 μm , 50 μm 85 μm and 120 μm (resonance VI - dashed circles). c) S-parameter calculations for resonances VI and VII for paper thicknesses of 30 μm (blue), 50 μm (black), 85 μm (red) and 120 μm (yellow) used to confirm results of a) and b). A clear change of peak shape is seen for resonance VII between thicknesses of 50 μm and 85 μm . Resolution step for calculations is 0.25 GHz in a) and c)	58
Figure 4.6	a) Fiber reflection spectra calculated using S-parameter approach for different values of water content $w = 0$ (black), $w = 0.85\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.01$ (blue); $w = 2.5\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.03$ (green); $w = 4.1\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$ (red) and a fixed paper thickness of 50 μm . Reduction in the maximal values of the reflection coefficient at resonances is clearly visible when the paper loss increases. b) Maximal value of the reflection coefficient for peaks I – VII. Circles – S-parameter calculations, solid curves - fitted lineshape 4.3. c) field distribution for resonance I at $\epsilon'' = 0$ and $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$	59
Figure 5.1	Calcul de $ S_{21} ^2$ effectué par COMSOL pour différents nombre d'éléments. Le système est celui du chapitre 4, avec un substrat de 320 μm d'épais et 50 μm de papier sec ($\epsilon'' = 0$). La résolution en fréquence sur ce graphique est de $\Delta f \approx 0.34$ GHz, ce qui empêche la discrimination d'une résonance près de 278 GHz.	61
Figure 5.2	Convergence des $f_r = \omega_r/2\pi$ extraits à partir d'une régression des courbes de $ S_{21} ^2$. Les valeurs obtenues sont en bleu alors que la courbe de régression est en rouge. Le taux de convergence à N élevé est de $p = 4.45$	62

Figure 5.3	Schématisation de l'approximation faite par la condition frontière périodique. La condition copie la cellule élémentaire intégralement, incluant la fibre et la puissance injectée. La fibre peut donc échanger de l'énergie avec ses copies virtuelles.	63
Figure 5.4	Mesure de la transmission du système fibre-métamatériau et fibre-substrat dans la plage spectrale de 0.25 THz - 0.4 THz. La résolution est de ~ 1.5 GHz. Les oscillations périodiques semblent correspondre à un effet de Fabry-Pérot dans la lentille de Si. La légende montre le placement du nanopositionneur (en mm) pour la métasurface (courbe rouges) et pour le substrat seul (courbes vertes) ; la fibre est en contact avec la surface pour une valeur de ~ 3.00 mm. Le niveau de bruit n'est pas discernable sur le graphique.	64

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

λ	Longueur d'onde
ω	Fréquence angulaire
ϵ	Permittivité d'un matériau
ϵ_r	Permittivité relative
ϵ_0	Permittivité du vide ($8.85 \cdot 10^{-12} \text{Fm}^{-1}$)
μ	Perméabilité d'un matériau
μ_r	Perméabilité relative
μ_0	Perméabilité du vide ($4\pi \cdot 10^{-7}$)
c	vitesse de la lumière ($(\epsilon_0\mu_0)^{-1/2} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$)
Λ	Périodicité
FEM	méthode des éléments finis finite element method
PMMA	polyéthylène à faible densité low-density polyethylene
FSS	surface à fréquence sélective frequency selective surface
SRR	Résonateur à anneaux coupés split-ring resonator
EIT	transparence induite par électromagnétisme electromagnetically induced transparency
PPWG	guide d'onde à plaques parallèles parallel plate waveguide
THz-TDS	spectroscopie THz dans le domaine du temps THz time domain spectroscopy

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

La plage de fréquences THz (0.1 THz - 10 THz) est située entre l'infra-rouge et les ondes millimétriques. Cette plage a très longtemps été peu étudiée, entre autre parce que les sources étaient inexistantes ou très dispendieuses. En effet, à ces fréquences, il n'existe pas de milieu de gain tel que dans le visible ou l'infrarouge ; de plus, l'électronique ne réagit pas à ces fréquences. Les sources actuelles sont principalement basées sur la rectification optique d'impulsions femosecondes produites par un laser Titane-Saphir, par des lasers à électrons libres ou par mélange à quatre ondes dans un milieu non-linéaire. Il existe également le laser à cascade quantique, basé sur des sauts quantiques dans des hétérojonctions à semiconducteurs, capable de produire quelques centaines de milliwatts, mais qui nécessite un refroidissement cryogénique. À l'exception de cette dernière classe, les sources sont relativement larges et requièrent environ 1m de surface sur une table optique. Ceci contraste fortement avec l'optique ou les micro-ondes où les sources peuvent être excessivement compactes.

En ce qui a trait aux détecteurs, il existe deux classes, les bolomètres et les détecteurs directs. La première est peu dispendieuse, mais possède une résolution en temps (et en fréquence) basse alors que la seconde possède une résolution de l'ordre de la nanoseconde, mais est basée sur des dispositifs complexes.

Un autre problème avec l'utilisation des ondes THz est l'absorption des matériaux. En effet, les matériaux optiques sont opaques à ces longueurs d'ondes et on doit recourir à des diélectriques secs afin d'obtenir une transmission acceptable. Parmi ces matériaux, on peut mentionner le silicium, une grande quantité de polymères, dont le polyéthylène à faible densité (LDPE), le verre de quartz ainsi que la plupart des textiles. Le développement de technologies THz doit donc être basé sur ces matériaux. Par contre, le faible nombre de matériaux disponibles limite les applications pratiques.

1.1 Cristaux photoniques et métamatériaux

Une clé à la résolution de ce problème de matériaux disponibles est le contrôle de la lumière par le biais de cristaux photoniques. On appelle cristal photonique n'importe quelle structure périodique, de période Λ comparable à la longueur d'onde λ , influant sur la propagation des

ondes électromagnétiques. Les propriétés de celui-ci peuvent être entièrement choisies lors de la conception du cristal photonique. Le modèle le plus simple de cristal est un réseau de cylindres de permittivité ϵ_1 dans une matrice de permittivité ϵ_2 .

D'un autre côté, des matériaux artificiels nommés métamatériaux ont été développés depuis la démonstration pratique de leur fabrication [1]. Ces matériaux sont en fait des cristaux photoniques chez lesquels la périodicité est beaucoup plus petite que la longueur d'onde ($\Lambda \ll \lambda$). Ces matériaux permettent en théorie de contrôler entièrement les propriétés effectives du milieu en choisissant judicieusement la géométrie. Lorsque ces métamatériaux sont déposés en 2D, sur une surface, on parle alors de métasurfaces. Ces structures sont beaucoup mieux maîtrisées que les métamatériaux 3D de par la facilité de fabrication. De plus, la grande longueur d'onde des THz permet de faciliter davantage la fabrication. Dans la littérature, on note cependant une abberation dans le langage scientifique, puisque la condition sur la périodicité n'est pas toujours respectée alors que les dispositifs sont toujours appelés métamatériaux. On peut citer par exemple les surfaces à fréquences sélectives (FSS) de [2] où la périodicité atteint $\Lambda \sim \lambda/4$ ainsi que les convertisseurs de polarisation de [3] où $\Lambda \sim \lambda/5$.

Des dispositifs extrêmement sensibles ont été réalisés à partir de ces métamatériaux. Parmi les applications potentielles, on peut nommer des senseurs, capables de mesurer des épaisseurs à des fractions de la longueur d'onde [4], ainsi que des applications pour les télécommunications THz, à l'aide de métamatériaux accordables à haute fréquence [5]. Bien que ces dispositifs aient des sensibilités incroyables, les mesures sont toujours faites à l'aide d'un faisceau libre, ce qui complique énormément l'implémentation pratique d'un tel système. En effet, il n'est pas toujours possible d'avoir la source à proximité de la mesure dans un milieu industriel.

1.2 Éléments de la problématique

L'utilisation d'un guide d'onde pour acheminer la lumière vers la métasurface est une géométrie beaucoup plus prometteuse qu'un faisceau dans l'air. En effet, la source peut être distante de l'endroit où la mesure est effectuée et un guide d'onde permet de contourner des obstacles, sans ajout de pièces telles que les lentilles. Certaines géométries ont été proposées pour remédier à ce problème, par exemple, le *lab-sur-fibre*, où une métasurface a été déposée à l'extrémité d'une fibre optique pour effectuer les mesures. On peut également citer le dépôt du métamatériau directement sur un guide d'onde. Il est aisé de travailler avec ces géométries, mais elles ne permettent pas toute la flexibilité d'intégration de l'utilisation d'un guide d'onde directement couplé avec une surface arbitraire. Il est donc encore d'intérêt d'explorer cette

avenue et ce mémoire s'attaque donc directement au problème. Une des principales conséquences de l'utilisation d'une fibre optique est la destruction d'une symétrie de translation de la métasurface. Tel qu'illustré sur la figure 1.1, le système final n'est périodique que dans une seule direction.

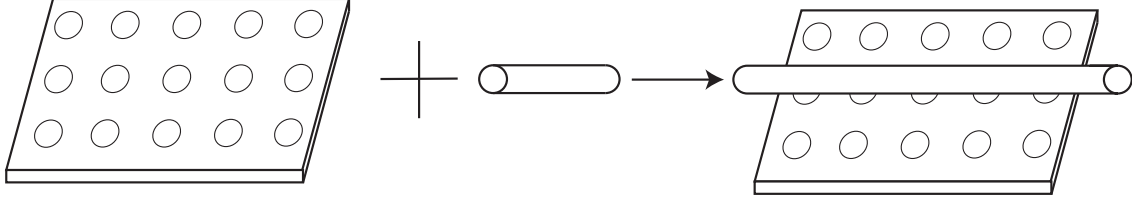


Figure 1.1 Brisure de symétrie engendrée par l'ajout de la fibre

Il existe plusieurs classes de guides d'onde THz. Parmi ceux-ci, les guides d'onde sous longueur d'onde ont un champ évanescent avec une décroissance très lente à l'extérieur de la fibre, ce qui rend l'interaction grande. Cette caractéristique les rend attrayants pour effectuer l'excitation de la métasurface. De plus, la fabrication de ces fibres est facile et leurs propriétés bien contrôlées, contrairement aux fibres microstructurées. De surcroît, il serait difficile d'utiliser un guide métallique puisque le champ est très confiné dans le guide.

Dû à cette grande interaction, il est difficile de penser que la méthode habituelle de calcul de perturbation sera suffisante, où deux supermodes sont formés à partir de deux modes en accord de phase. En fait, pour des modes ayant des interactions très fortes, le non-respect de cette condition d'accord de phase n'interdit plus une interaction entre les bandes optiques. Les relations de dispersion dans la structure doivent alors être calculées par la résolution des équations de Maxwell vectorielles, de façon numérique, puisqu'il n'existe habituellement pas de solution analytique. Ce calcul doit être effectué en trois dimensions, ce qui peut requérir une puissance de calcul assez large, selon la précision voulue du calcul. Une schématisation de la cellule de calcul est présentée sur la figure 1.2, reproduite à partir de l'article présenté au chapitre 4.

1.3 Objectifs de recherche

C'est cette combinaison d'une métasurface et d'un guide d'onde qui sera étudiée dans ce mémoire. Bien que cette géométrie semble *a priori* plus pratique que l'utilisation d'un faisceau non-confiné, du point de vue théorique, le calcul doit être effectué en 3D. Le but de ce mémoire est donc de caractériser la transmission dans un guide d'onde lorsqu'on l'approche

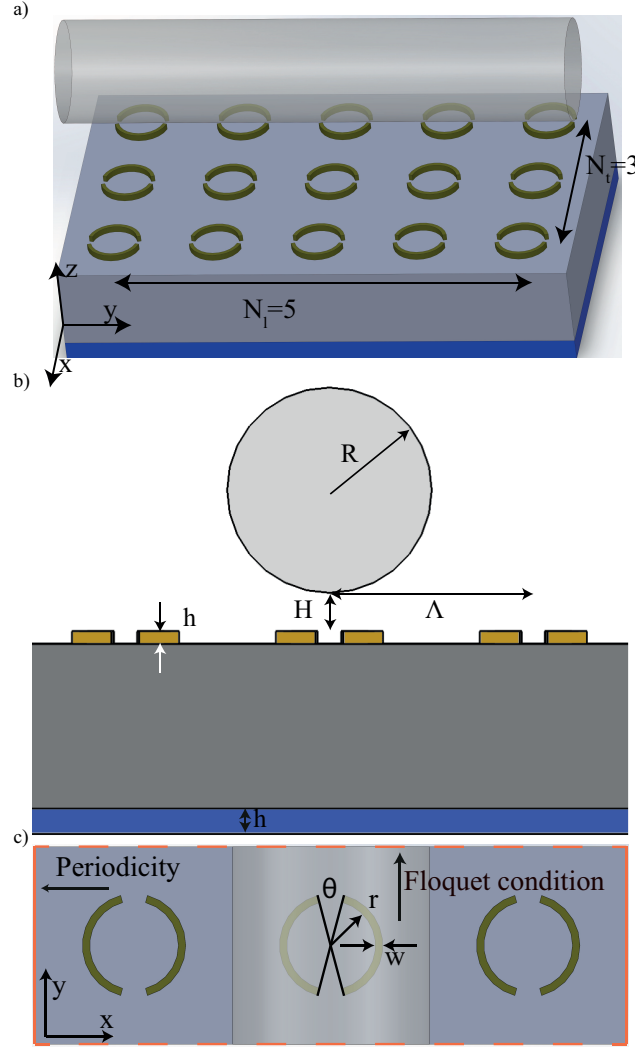


Figure 1.2 a) 3D rendering of a subwavelength THz fiber interrogating a frequency selective surface featuring 6 periods in the longitudinal direction and 3 periods in the transversal direction. Test film is placed in contact with the flat part of a substrate. b) Side view, c) top view of the unit cell that corresponds to a) and that we use in the band diagram calculations.

d'une métasurface. Plus particulièrement, le comportement du système dans le domaine fréquentiel sera étudié et analysé avec des méthodes semi-analytiques. La fonctionnalisation de la géométrie proposée est également démontrée par la conception d'un capteur pour le papier, capable de mesurer simultanément l'épaisseur et la teneur en eau.

1.4 Plan du mémoire

Tout d'abord, une revue de littérature sera présentée dans le chapitre 2. Elle abordera d'abord les concepts de base de l'optique guidée et des cristaux photoniques, ainsi que les

particularités des guides aux fréquences THz. Ensuite on traitera des différences entre métamatériaux et cristaux photoniques, puis des caractéristiques des systèmes multirésonants. La suite de la revue de littérature portera sur les senseurs THz. Les particularités de la méthode des éléments finis (FEM) pour le calcul de systèmes périodiques seront alors présentées. Le chapitre 3 portera sur la modélisation de la transmission d'un coupleur métasurface-fibre, à l'aide des diagrammes de bandes ainsi que du calcul direct de la transmission. Cette modélisation a été publiée dans le journal *Optics Express*. Le chapitre 4 portera sur la conception d'un senseur pour le papier, capable de déterminer simultanément à partir de la réflexion l'épaisseur et le contenu en eau ; ce dispositif a fait l'objet d'une soumission dans le *Journal of Optics*. Enfin, le chapitre 5 abordera les aspects méthodologique qui ne sont pas abordés dans les chapitres 3 et 4.

CHAPITRE 2

REVUE DE LITTÉRATURE

Ce chapitre présente d'abord les concepts théoriques de l'optique guidée ainsi que des systèmes périodiques. On présente ensuite les différences entre métamatériaux et cristaux photoniques, étude nécessaire avec les métasurfaces récemment développées, ainsi que leur comportement typique en fréquence. Cette partie sera suivie par une section sur les systèmes multirésonants. On présentera ensuite une brève revue des senseurs dans les fréquences THz, puis une courte section sur les particularités de la FEM pour le calcul de structures périodiques.

2.1 Électromagnétisme, guides d'ondes et cristaux photoniques THz

Cette section présente la théorie sur les guides d'ondes et le calcul de la distribution des champs électromagnétiques. Dans un premier temps, les équations de Maxwell dans le domaine des fréquences seront présentées. Ensuite, l'effet de la périodicité d'une structure sur la propagation des ondes sera abordé. En dernier lieu, on traitera des particularités des guides THz.

2.1.1 Équations de Maxwell

Dans le cadre de l'électromagnétisme, on utilise les équations de Maxwell afin de modéliser le comportement des champs. Ces équations s'écrivent :

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

où $\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont les champs électrique et magnétique, ρ est la densité de charges et $\vec{J}$ est le courant de charges. Les champs $\vec{B}$ et $\vec{D}$ sont reliés aux champs électrique et magnétique par les relations $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ et $\vec{B} = \mu \vec{H}$. En écrivant les équations (2.2)-(2.4) dans le domaine des fréquences, avec la transformation $\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$ et $\vec{J} = \sigma \vec{E}$, on obtient alors :

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \quad (2.6)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \vec{H} = (\sigma - i\omega\epsilon)\vec{E} \quad (2.8)$$

Le terme $(\sigma - i\omega\epsilon)$ est généralement remplacé par une permittivité effective $\epsilon_{eff} = \epsilon + \frac{i\sigma}{\omega\epsilon_0}$. L'équation habituellement résolue s'obtient en prenant le rotationnel de (2.6) et en utilisant $k_0 = \omega/c$:

$$\nabla \times \mu_r^{-1} \nabla \times \vec{E} = k_0^2 \epsilon_{r,eff} \vec{E} \quad (2.9)$$

Ce qui constitue une équation d'onde aux valeurs propres dont les solutions sont habituellement recherchées dans une forme $\sim \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$. Chaque couple $(\vec{k}, \omega)$ correspond à un mode propre de propagation. Dans un milieu infini, uniforme, à ω constant, les solutions de (2.9) sont des sphères de rayon k_0 .

Par contre, si on crée une structure où ϵ ou μ n'est pas constant, on peut créer un guide d'onde. Un des cas simples est la fibre optique, dans laquelle le champ électrique est confiné dans un cylindre de permittivité ϵ_c entouré d'une gaine de permittivité $\epsilon_g < \epsilon_c$ en $(\hat{x}, \hat{y})$ et se propage dans l'axe du cylindre, en $\hat{z}$. Puisqu'à l'interface entre le cylindre et la gaine la projection du vecteur d'onde sur la surface est continue, on s'intéresse alors à la projection de $\vec{k}$ sur $\hat{z}$, soit k_z et on distingue deux classes de solutions. Soit $k_z > k_0$, dans ce cas le vecteur d'onde transverse dans la gaine $\vec{k}_t = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ devient imaginaire, d'où le confinement. Ces modes sont appelés guidés. Sinon $k_z < k_0$, dans ce cas, l'onde est évanescence dans la direction $\hat{z}$ et le mode s'échappe du guide ; ces modes sont appelés à fuite ou de radiation.

2.1.2 Périodicité et théorème de Bloch

La section précédente considérait l'équation de Maxwell dans sa forme la plus simple, soit (2.9). Il est bien connu que les solutions et l'équation différentielle partagent les mêmes symétries. Par exemple, pour le cas de la fibre optique, les solutions sont normalement exprimées en terme de sommes de fonctions de Hankel, $H_j(r)$ et de Bessel, $J_j(r)$, multipliées par un terme en $\sin(m\theta)$, où j et m sont des entiers.

Dans le cas d'une périodicité, il existe des grandeurs $l_1, l_2, \dots, l_n$ à partir desquelles on peut bâtir un vecteur quelconque du réseau direct $\vec{a} = p_1 l_1 \hat{e}_1, \dots, p_n l_n \hat{e}_n$, où les p_i sont des entiers et où n représente le nombre de dimensions à la périodicité. Un opérateur de translation $\hat{T}_{\vec{a}}$, opéré sur ϵ laisse le système inchangé : $\epsilon(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{a}}\epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} + a_1 \hat{e}_1 + \dots + a_n \hat{e}_n)$, où $a_1, a_2, \dots, a_n$ sont les composantes de $\vec{a}$. Dans ce cas, on peut écrire les solutions sous la forme $\vec{E}(\vec{r}) = \vec{u}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, où $\vec{u}_{(\vec{k}, \omega)} = \hat{T}_{a_1, \dots, a_n} \vec{u}_{(\vec{k}, \omega)} = \vec{u}_{(\vec{k} + \vec{G}, \omega)}$, si $\vec{G}$ est un vecteur du réciproque à $\vec{l} = (l_1, \dots, l_n)$. La preuve de ce théorème est relativement simple si l'on part du fait que l'application de $\hat{T}_{\vec{a}}$ sur $\vec{E}$ doit donner la même solution à une constante unitaire près, puisque $\hat{T}_{\vec{a}}$ commute avec (2.9) :

$$\vec{E}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r}) = C_i \hat{T}_{\vec{a}} \vec{E}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r}) = C_i \vec{E}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r} + \vec{a}), \quad (2.10)$$

où on peut donner la forme $C_i(\vec{a}) = \exp(i\theta(\vec{a}))$. En utilisant le fait que l'opérateur est applicable un nombre quelconque de fois, on obtient $C_i C_i = \exp(i\theta(\vec{a}))^2 = \exp(i\theta(2\vec{a}))$, soit $C_i(\vec{a}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a})$ et la solution s'exprime donc comme $\vec{E}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r}) = \vec{u}_{(\vec{k}, \omega)}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ où $\vec{u}_{(\vec{k}, \omega)}$ est périodique. Également, on trouve la propriété $\vec{u}_{(\vec{k} + \vec{G}, \omega)} = \vec{u}_{(\vec{k}, \omega)}$ en utilisant $C_{i, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{a}) = \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{a}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{a}) = C_{i, \vec{k}}$, puisque $\vec{G} \cdot \vec{a}$ est un multiple de 2π ($G_i l_i = 2\pi$). Cette propriété permet de simplement calculer (2.9) dans la première zone de Brillouin, soit la cellule élémentaire du domaine réciproque ($k_{max} = \pi/\Lambda$ en 1D, où $\Lambda = l_1$). On note que si le guide présente une symétrie de translation, les théorèmes sont toujours valides, mais dans ce cas, $\Lambda \rightarrow 0$ et donc $k_{max} \rightarrow \infty$ ce qui amène la zone de Brillouin à l'infini et le problème se simplifie à ce qui a été développé dans 2.1.1.

Les modes sont habituellement représentés dans un diagramme de dispersion $\omega - k$, où on peut dériver quelques propriétés. Les modes de propagation forment des bandes continues, dont la dérivée est nulle lorsque $\vec{k}$ atteint un point de symétrie : $v_g = \partial\omega/\partial k = 0$. Une des conséquences de ceci est la hausse de la densité d'états optiques disponibles dans le système. Si l'on définit le nombre d'états comme :

$$n = \int g(\omega) d\omega \quad (2.11)$$

où $g(\omega) d\omega$ est la densité d'états à une énergie ω , soit le nombre d'état entre une fréquence ω et $\omega + d\omega$. Puisque les solutions de (2.9) peuvent être représentées par des surfaces à $\omega(k)$ constant, par une dérivée en chaîne, on peut représenter $d\omega$ par :

$$d\omega = \frac{\partial\omega}{\partial k_x} dk_x + \frac{\partial\omega}{\partial k_y} dk_y + \frac{\partial\omega}{\partial k_z} dk_z = \nabla\omega \cdot d\vec{k}, \quad (2.12)$$

où $\nabla\omega(k)$ est un vecteur normal à la surface $\omega(k)$. On peut changer le système de coor-

données pour avoir une intégrale sur la surface $\partial\omega$ et la densité d'état peut se représenter comme l'intégrale sur cette surface :

$$g(\omega) \propto \iint_{\partial\omega} \frac{dA}{|\nabla\omega|}, \quad (2.13)$$

où dA est un élément d'aire de la surface $\omega(k)$. Une des principales conséquences des points de dérivée nulle dans le diagramme de bandes est donc la divergence de $g(\omega)$ et les points sont appelés singularités de Van Hove. On note que la divergence de cette intégrale dépend également de la forme de dA , donc que $\nabla\omega \rightarrow 0$ n'est pas une condition suffisante pour que $g(\omega)$ diverge. Les points où $g(\omega)$ est divergent représentent des résonances et la réponse typique est celle présentée dans les sections 2.2.3 et 2.3.

Également, pour certaines gammes de fréquences, appelées bandes interdites, il est possible que (2.9) n'ait pas de solutions. Dans ce cas, le matériau devient réfléchissant pour ces fréquences et la propagation est évanescence ($\sim \exp(-\vec{k} \cdot r)$).

Pertes

Dans l'équation (2.9), la permittivité peut comporter une partie imaginaire qui représente les pertes dans le matériau. Du point de vue de la propagation, ces pertes ajoutent une contribution imaginaire soit à ω ou à $\vec{k}$, ce qui constitue une onde d'amplitude décroissante. Au niveau mathématique, il n'y a pas de différence entre les résultats, mais il y a une différence fondamentale dans l'interprétation, puisque si ω possède une partie imaginaire, elle représente un temps de vie (en s^{-1}) alors que si elle est sur $\vec{k}$, elle représente une longueur caractéristique de propagation (en m^{-1}). Si la dispersion n'est pas trop élevée ($\partial\omega/\partial k \sim c$), on peut relier le temps de vie à la longueur caractéristique par la relation $\Im(\omega) = v_g \Im(k)$. Comme il sera mentionné dans 2.3, les résonances sont les fréquences où les pertes ont le plus d'effet et aux abords d'une résonance, il n'existe pas de relations simples entre $\Im(\omega)$ et $\Im(k)$.

2.1.3 Guides d'onde THz

Les guides d'onde pour les fréquences THz présentent quelques différences notables avec les guides traditionnels, qu'ils soient issus de l'optique ou des ondes millimétriques. D'abord, du côté de l'optique, on utilise principalement des guides diélectriques à base de verres, principalement de silice. Le verre optique présente des pertes de l'ordre de fractions de décibels par kilomètre à $\lambda = 1 \mu m$. Par contre, dans les THz, on mesure des pertes de quelques dizaines de décibels par centimètre pour le BK7 et de quelques décibels par centimètre pour le verre de silice pur [6]. On observe des pertes plus faibles du côté des polymères, avec des pertes

de $\sim 0.85 \text{ dB cm}^{-1}$ pour le LDPE [7] et de $\sim 1.3 \text{ dB cm}^{-1}$ pour le polytétrafluoroéthylène (PTFE) [8]. Les matériaux cristallins présentent également des pertes faibles, de l'ordre de $\sim 0.04 \text{ dB cm}^{-1}$ pour le Si et de $\sim 2 \text{ dB cm}^{-1}$ pour le saphir [9]. Cependant, il est impossible de construire un guide long avec des matériaux cristallins parce que le coût du volume est prohibitif et que le matériau n'est pas souple.

De par ces faits, les guides diélectriques sont habituellement basés sur un guidage dans l'air, c'est-à-dire qu'une importante partie du champ électrique est localisée à l'extérieur du diélectrique, qui est habituellement un polymère. Le guide le plus simple de ce type est une fibre à saut d'indice sous-longueur d'onde, constitué d'un cylindre de diélectrique dont le diamètre est inférieur à la longueur de l'onde. Le champ montre alors une décroissance très lente, de type logarithmique, à l'extérieur de la fibre [10]. Plusieurs autres guides de ce type existent, basés sur l'inclusion de porosité dans le diélectrique pour réduire les pertes [7, 11, 12] ou sur des fibres à cristaux photoniques afin d'obtenir un guidage dans l'air [13].

Du côté des ondes millimétriques, les guides utilisés sont généralement métalliques, c'est-à-dire qu'ils sont formés par une coquille métallique qui confine le champ à l'intérieur. Les pertes de ces guides sont déterminées par la permittivité effective du matériau, qui peut être modélisée par une forme de Drude généralisée [10] :

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega_{\gamma}\omega} \quad (2.14)$$

Le coefficient de réflexion à la surface de métal dépend alors fortement de la fréquence. Si l'on prend la série de la norme au carré du coefficient de réflexion à incidence nulle entre de l'air et le métal ($r = (1 - \sqrt{\epsilon})(1 + \sqrt{\epsilon})^{-1}$), elle montre une dépendance en $|r|^2 \sim 1 - 2\sqrt{2}\gamma\omega_p^{-1}\sqrt{\omega}$. Puisque la fréquence devient relativement large dans les THz, les pertes deviennent significatives. Il existe quelques approches pour réduire ces pertes, en utilisant un confinement en 1D seulement, avec deux plaques métalliques, le guide d'onde à plaques parallèles (PPWG), [14]. Un autre type de guide d'onde est basé sur la transmission sur les fils métalliques. Dans ces guides, l'onde est confinée sur la surface du métal dans la forme d'un plasmon-polariton et prend la forme d'une onde de Sommerfeld [15].

2.2 Métamatériaux vs cristaux photoniques

Les propriétés d'un matériau ayant un indice de réfraction négatif ($\mu \leq 0, \epsilon \leq 0$) ont d'abord été étudiées par Veselago [16], qui a démontré nombre de leur propriétés au milieu du siècle dernier. Tout d'abord, ce matériau fictif exhibait une réfraction négative, c'est-à-dire

que le rayon réfracté par une interface restait du même côté de la normale à la surface. De plus, le vecteur de Poynting était orienté en direction inverse au vecteur d'onde, donc la phase se propageait dans la direction inverse à l'énergie. L'article est resté peu cité jusque dans les années 2000, car il n'existait pas dans la nature de tels matériaux. Il y a les métaux, les semiconducteurs dopés et les plasmas qui présentent une permittivité négative et quelques ferrites qui ont une perméabilité négative, mais aucun de ceux-ci n'ont simultanément la permittivité et la perméabilité négative. L'intérêt de cette recherche avait alors peu de sens, puisqu'il était impossible d'appliquer la théorie à quelque dispositif que ce soit.

2.2.1 Milieux effectifs

Il a fallu attendre Pendry avant la véritable effervescence du domaine, avec la fabrication d'un matériau [17] à indice de réfraction négatif. Une différence importante entre le travail de Veselago et celui de Pendry est la dispersion spatiale : dans la description initiale faite par Veselago, le matériau étudié présentait une permittivité $\epsilon \leq 0$ constante ainsi qu'une perméabilité $\mu \leq 0$ alors que le matériau de Pendry était constitué de boucles de métal sur une matrice de FR4, donc $\mu = \mu_0$, $\epsilon = \epsilon(\vec{r}, \omega)$. Pour pallier à ce genre de problème, on utilise couramment les approximations de milieux effectifs, permettant d'éviter la dispersion spatiale. Les premières études sur ce sujet datent de Clausius et Mossotti au 19^e siècle [18, 19] et donnent la relation entre la permittivité ϵ et la polarisabilité α :

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi}{3} N \alpha, \quad (2.15)$$

où N est la densité d'inclusions. Si l'on considère des inclusions sphériques de rayon a , la polarisabilité prend une forme simple :

$$\alpha = \frac{\epsilon_i - 1}{\epsilon_i + 2} a^3, \quad (2.16)$$

ce qui permet d'obtenir le modèle de Bruggeman pour une matrice de permittivité ϵ_m :

$$\frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_m}{\epsilon_{eff} + 2\epsilon_m} = \delta_i \frac{\epsilon_i - \epsilon_m}{\epsilon_i + 2\epsilon_m}, \quad (2.17)$$

qui est valide pour δ_i faible. Dans le cadre des métamatériaux, il ne s'agit pas d'inclusions sphériques très petites, mais de structures métalliques résonantes relativement grandes et les équations précédentes ne sont d'aucune utilité. Pour certaines géométries simples, on peut utiliser un modèle constitué de capacitances et d'inductances formant une ligne de transmission [20]. Cette technique est habituellement assez précise pour permettre d'estimer les réponses correctement. Pour les cas plus compliqués, plusieurs méthodes ont été développées

pour déterminer les propriétés effectives, la plupart des méthodes étant basées sur l'analyse de la transmission et de la réflexion au travers d'un échantillon mince, qu'il s'agisse d'une simulation [21, 22] ou d'une expérience [23, 24]. La condition essentielle pour que cette méthode soit valide est simplement que la périodicité des structures soit largement plus petite que l'onde incidente.

2.2.2 Validité des milieux effectifs et considérations angulaires

Il a été mentionné (§1) que pour la plupart des applications récentes, le pas de périodicité était supérieur à la limite de l'approximation des milieux effectifs ($\Lambda < \lambda/10$). Bien que ce critère soit empirique et dépendant du système, il est alors normal de s'interroger sur la validité de cette description dans le régime mésoscopique utilisé. Menzel *et al.* se sont penché sur la question dans le cadre des matériaux *fishnets* [25].

Ces métamatériaux sont diagonaux ($\hat{\epsilon} = \text{diag}(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$, $\hat{\mu} = \text{diag}(\mu_x, \mu_y, \mu_z)$), ce qui permet d'obtenir des modes TE et TM découplés. Cette condition permet d'exclure les effets de biréfringence effective du matériau. Les auteurs de [25] ont alors calculé la transmission et réflexion sur une couche de métamatériau en fonction de l'angle d'incidence.

La conclusion est remarquable, puisqu'on constate qu'à partir d'un ratio $\Lambda/\lambda > 0.10$, on peut observer une variation de 5% pour un paramètre effectif normalement fixe lorsque l'angle d'incidence change. Cette conclusion a été obtenue spécifiquement pour les *fishnets*, mais on peut supposer que le comportement est similaire pour tous les types de surfaces. Il est alors difficile d'utiliser les paramètres effectifs, puisqu'on devrait les utiliser comme une fonction de deux paramètres soit la fréquence, ω , et le vecteur d'onde ou l'angle d'incidence, $\vec{k}$ ou θ : $\epsilon = \epsilon_{eff}(\vec{k}, \omega)$ ou $\epsilon = \epsilon_{eff}(\theta, \omega)$.

Plusieurs groupes ont tenté d'utiliser des géométries insensibles à l'angle d'incidence, principalement pour les FSS, une idée provenant de [26]. Pour ces métasurfaces, une solution basée sur deux anneaux concentriques a été proposée [27] ainsi qu'une basée sur l'utilisation de carrés [28]. Bien que la fréquence de résonance change peu avec l'angle dans ces métamatériaux, il est évident que la bande passante, elle, est fortement dépendante de l'angle d'incidence.

2.2.3 Comportement fréquentiel

Un des aspects abordés dans §2.2.2 était la caractérisation de ϵ en fonction de l'angle d'incidence sur la surface. Généralement, on s'intéresse plutôt au comportement de ces matériaux en fréquence, afin d'obtenir des filtres, potentiellement accordables afin de construire un modulateur, par exemple [5, 29]. D'autres applications existent déjà, principalement pour

la mesure d'épaisseurs de couches minces [30], mais également pour des mesures biologiques [31]. Les FSS ainsi qu'une large partie des métamatériaux sont des structures résonantes, au sens où il existe au moins une fréquence pour laquelle il y a une forte accumulation d'énergie. Les SRR sont un excellent exemple d'un métamatériau, où la réponse peut être caractérisée par un modèle de Lorentz :

$$\mu_{eff} = 1 + \frac{\omega_p}{\omega_0 - \omega + i\omega\gamma}, \quad (2.18)$$

où ω_0 est la fréquence de résonance et γ la bande passante. Pour un métamatériau présentant ce type de réponse, il y a deux cas typiques de réponse, soit qu'elle est extrêmement forte et à bande passante faible, soit à réponse faible et à très large bande. Il est évident que certains cas ont peu d'intérêt ; par exemple, une permittivité effective négative est en effet bien peu utile si la bande passante du système est largement plus faible que celle de n'importe quelle source. Pour être capable d'obtenir des caractéristiques intéressantes, dans le cas des SRR, on utilise généralement plusieurs résonances ; on construit des structures à plusieurs résonateurs [28] ou incluant une asymétrie, permettant l'excitation d'un mode quadrupolaire [32, 33].

2.3 Systèmes multirésonants

Cette section présente le comportement en fréquence de systèmes multirésonants, c'est-à-dire ayant de multiples résonances. Un exemple d'un tel système est un guide d'onde couplé à une cavité multimode. On pourrait avoir tendance à penser que la forme de Lorentz (équation (2.18)) est la forme fondamentale des résonances et que l'addition de deux structures résonantes ou l'ouverture d'un couplage symétrique-asymétrique permet d'obtenir une forme proche de celle de Lorentz, *i.e.* que la réponse R du système présente une forme :

$$R \sim \frac{\omega_{p,1}}{\omega_1 - \omega + i\gamma_1} + \frac{\omega_{p,2}}{\omega_2 - \omega + i\gamma_2}. \quad (2.19)$$

Cependant, lors des simulations et des mesures expérimentales, on observe plutôt un profil de Fano entre les résonances :

$$|R|^2 \sim \sum \frac{(\omega - \omega_0 + q\Gamma)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2}, \quad (2.20)$$

où q caractérise l'asymétrie de la résonance ($q = 0$ et $q = \pm\infty$ sont des profils Lorentziens) et Γ la largeur de résonance. La source de cette forme particulière a été bien expliquée par S. H. Fan [34, 35]. En effet, si l'on considère un système où il existe un transport direct (par exemple un guide d'onde) ainsi qu'une résonance discrète (comme un résonateur diélectrique), il y a interaction et changement du profil. Les dérivations subséquentes font référence aux

paramètres $\bar{S}$, définis de la manière habituelle :

$$|S_+\rangle = \begin{pmatrix} S_{+,1} \\ S_{+,2} \\ \vdots \\ S_{+,n} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

$$|S_-\rangle = \begin{pmatrix} S_{-,1} \\ S_{-,2} \\ \vdots \\ S_{-,n} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$$|S_-\rangle = \bar{S} |S_+\rangle \quad (2.23)$$

Considérons le cas où il y a une seule résonance [34]. Dans ce cas, l'équation de la résonance s'écrit :

$$\frac{d}{dt}a = (j\omega_0 - 1/\tau)a + \langle \kappa^* | s_+ \rangle, \quad (2.24)$$

où a est l'amplitude de la résonance, ω_0 sa fréquence de résonance, τ est le temps de vie, $\langle \kappa^* |$ est l'opérateur de couplage entre l'entrée d'énergie $|s_+\rangle$ et la résonance, soit le recouvrement entre l'entrée et le champ de la résonance. On peut d'ailleurs écrire :

$$|s_-\rangle = \bar{C} |s_+\rangle + a |d\rangle, \quad (2.25)$$

où $|d\rangle$ est la projection du champ de a sur les modes de sortie du système $|s_-\rangle$ et $\bar{C}$ la matrice de transfert direct, qui, dans le cas d'un système à deux ports, prend la forme :

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} r & jt \\ jt & r \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

où r et t sont les coefficients de réflexion et de transmission. La figure 2.1 illustre le système dans un cas à deux ports.

Généralement, pour un guide d'onde on a $r = 0$, $t = 1$. L'utilisation des symétries de temps permet de montrer qu'il existe des relations simples entre les divers composantes de couplage, qui sont $\langle d | = \langle \kappa |$, $\langle d | d \rangle = 2/\tau$ et de plus que $\bar{C} |d\rangle^* = -|d\rangle$. Si le système présente une symétrie de plan miroir, on obtient alors facilement la matrice de paramètres de diffusion $\bar{S}$:

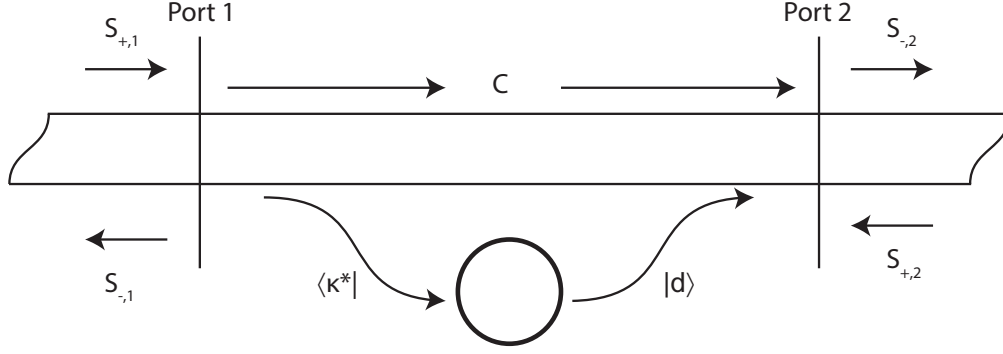


Figure 2.1 Illustration d'un système à 2 ports avec les diverses composantes de $|S_+\rangle$ et $|S_-\rangle$ indiquées. Le cercle représente un résonateur.

$$\bar{S} = \exp(j\phi) \left(\begin{pmatrix} r & jt \\ jt & r \end{pmatrix} + \frac{1/\tau}{j(\omega - \omega_0) + 1/\tau} \begin{pmatrix} -(r \pm jt) & \mp(r \pm jt) \\ \mp(r \pm jt) & -(r \pm jt) \end{pmatrix} \right), \quad (2.27)$$

où (2.27) est une forme de Lorentz semblable à (2.18) si r ou t est unitaire. Pour obtenir le profil de Fano, il faut soit que la matrice de couplage direct présente une résonance de telle façon à ce que t et r ne soient pas unitaires. Un exemple de ceci est donné sur la figure 2.2 où le paramètre de transmission du système est calculé pour différents r, t .

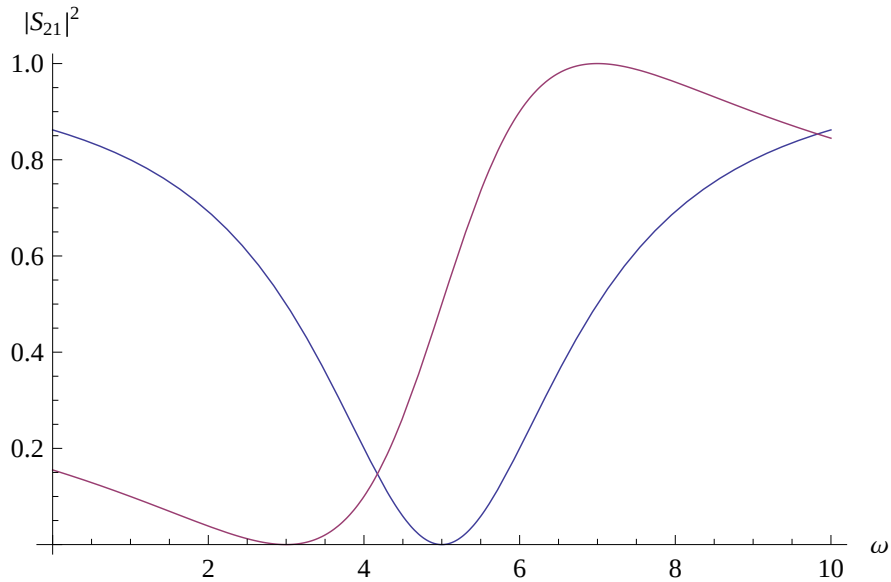


Figure 2.2 Paramètre $|\bar{S}_{21}|^2$ calculé pour $t = 1, r = 0$ en bleu et pour $t = 1/\sqrt{2}, r = 1/\sqrt{2}$ en majenta; les autres paramètres sont $\tau = 0.5$ et $\omega_0 = 5$. L'apparition d'un profil de Fano est évident pour la courbe majenta.

On peut également utiliser la généralisation à plusieurs résonances [35] pour obtenir un profil de Fano, même avec r ou t unitaire. Dans ce cas, l'équation différentielle régissant les résonances devient :

$$\frac{d}{dt}\vec{a} = (j\bar{\Omega} - \bar{\gamma})\vec{a} + \bar{K}^T |s_+\rangle, \quad (2.28)$$

où $\vec{a}$ est le vecteur d'amplitudes des résonances, $\bar{\Omega}$ est diagonal et représente leur fréquences propres, $\bar{\gamma}$ est leur décroissance temporelle (soit vers un port ou un autre mode résonant). $\bar{K}$ est la matrice de couplage entre les champs résonants de $\vec{a}$ et l'entrée d'énergie $|s_+\rangle$. On note que $\bar{\Omega}$ est une matrice diagonale. On a également :

$$|s_-\rangle = \bar{C} |s_+\rangle + \bar{D}\vec{a}, \quad (2.29)$$

où $\bar{C}$ est encore la matrice de couplage direct et $\bar{D}$ est la matrice représentant le couplage entre $\vec{a}$ et les modes de sortie $|s_-\rangle$. Des relations similaires sont aussi trouvées : $\bar{D} = \bar{K}$, $\bar{D}^T \bar{D} = 2\bar{\gamma}$, $\bar{C} \bar{D}^* = -\bar{D}$. De plus, il existe toujours un couplage entre les divers modes résonants si le nombre de résonances dépasse le nombre de ports. Un problème majeur avec cette généralisation est que les formes explicites des réponses sont très complexes et numériquement instables si on essaie d'effectuer une régression. L'utilisation d'une méthode non-linéaire demande d'estimer des valeurs initiales aux paramètres et ce choix est difficile, pour des raisons détaillées plus loin dans le chapitre.

Il existe également une autre méthode, plus simple, pour arriver à certains des résultats obtenus dans [35], pour quelques cas particuliers. Prenons le cas où on couple un guide d'onde sur un résonateur multimode. Il est alors simple d'approximer que la transmission directe est parfaite, i.e.

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On peut alors prendre la matrice de diffusion de transfert $\bar{M}$, définie comme :

$$\begin{pmatrix} S_{+,1} \\ S_{-,1} \end{pmatrix} = \bar{M} \begin{pmatrix} S_{-,2} \\ S_{+,2} \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

qui est alors dans la forme :

$$\bar{M} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} & -\frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} \\ \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} & 1 + \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

soit la même forme que dérivée dans [36] pour un guide couplé sur un résonateur. Pour un

système à 2 ports, il existe deux parités différentes possibles. En multipliant les matrices de transfert de chaque résonance, (2.31), on obtient la forme :

$$\bar{M} = \prod_j \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} & -\frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} \\ \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} & 1 + \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j} \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

qui est semblable à ce qu'on obtient à partir de (2.28) et (2.29), avec une différence notable. Les équations dérivées par S. Fan permettent l'existence de deux parités différentes, avec des interactions différentes. Cette parité est approximée par le signe de γ_j dans (2.32). Si on prend l'exemple de deux résonances, tel que fait dans [35], pour des parités semblables, (2.32) et (2.28),(2.29) donnent exactement le même résultat. Par contre, pour deux résonances de parités différentes, (2.32) n'est une bonne approximation avec les mêmes paramètres que si $|\omega_1 - \omega_2| > |\gamma_1| + |\gamma_2|$. Un exemple de cet effet est donné sur la figure 2.3, avec $\Delta\omega = 1.25$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 0.25$. Dans le cas contraire, les paramètres utilisés par (2.32) sont différents de (2.28) et (2.29), même si la régression peut être bonne dans les deux cas.

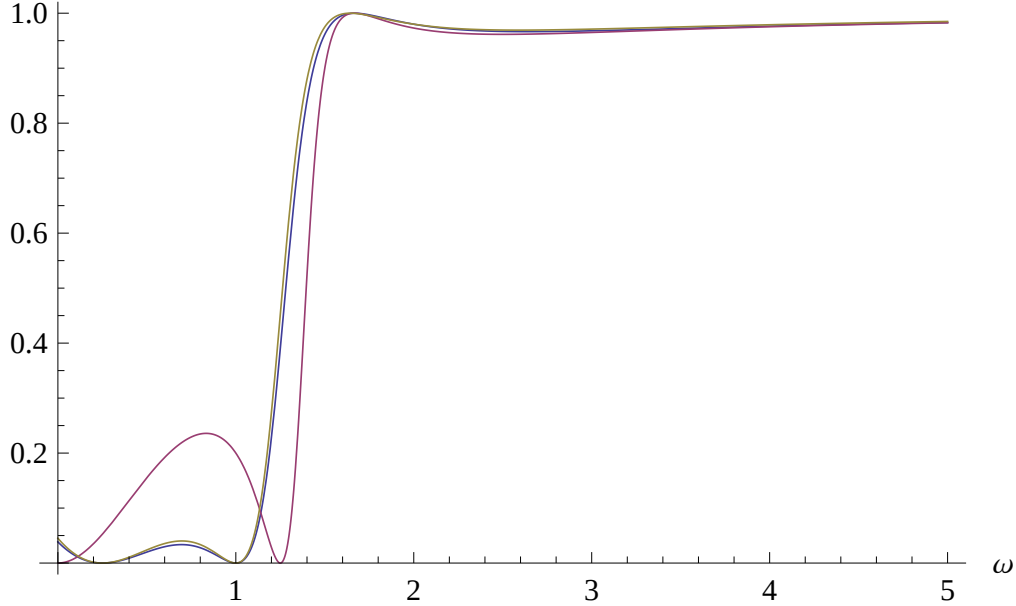


Figure 2.3 Validité de l'approximation faite par (2.32) pour $\omega_1 = 0$, $\omega_2 = 1.25$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 0.25$, en bleu le résultat exact, en magenta l'approximation avec les mêmes paramètres, en or l'approximation par $\omega_1 = 0.25$, $\omega_2 = 1$, $\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = -0.6$

Tel que mentionné précédemment, il est difficile de choisir les paramètres initiaux de régression. Celle-ci devient visible sur la figure 2.3. Intuitivement, il est aisé de penser que les résonances sont situées à $\omega = 0.25$ et à $\omega = 1$, soit les paramètres observés pratiquement. La

position des minimums de la courbe est donc une fonction de tous les paramètres de (2.28) et (2.29) alors que dans (2.32), le paramètre ω_j correspond directement à un minimum, ce qui permet de stabiliser la procédure de régression. Malheureusement, comme (2.32) est une approximation, il n'existe pas de transformation permettant de calculer les paramètres réels de (2.28) et (2.29). En pratique, ceci signifie que (2.32) est utilisée pour effectuer les régression, même si elle induit des erreurs.

2.3.1 Résonances de Fano, transparence induite, et leurs relations

La résonance de Fano est nommée en l'honneur de H. Fano, qui l'a exprimée dans la forme

$$|R|^2 \sim \frac{(q\Gamma + \omega - \omega_F)^2}{(\omega - \omega_F)^2 + \Gamma^2}, \quad (2.33)$$

lorsqu'il étudiait l'autoionisation des électrons [37]. Cette forme requiert le mélange d'un continu avec un état discret localisé. On peut la retrouver, par exemple, en étudiant la transmission au travers d'un puits quantique dont les états discrets ont une énergie égale à l'onde incidente.

Dans [35], il est dit que la transmission peut prendre la forme d'une résonance de Fano avec les équations (2.28) et (2.29). En fait, il s'agit plutôt d'un mélange de deux résonances et il est impossible d'obtenir la forme normalisée de (2.33), valide sur toutes les fréquences. Par contre, si on suppose deux résonances de largeur très différentes, $\gamma_1 \gg \gamma_2$, autour de ω_2 , la résonance à ω_1 a l'air d'un continuum. En utilisant une série de Taylor pour l'expression (2.32) autour de ω_2 et une autre pour (2.33) autour de $\omega_F - q\Gamma$, on peut mettre les termes égaux jusqu'au troisième ordre. On trouve alors les relations :

$$q = \frac{\gamma_1}{\omega_2 - \omega_1} \quad (2.34)$$

$$\Gamma = \frac{\gamma_2}{1 + q^2} \quad (2.35)$$

$$\omega_F = \omega_2 + q\Gamma \quad (2.36)$$

La nomenclature utilisée parfois dans les articles (sur des systèmes multirésonants) citant une résonance de Fano est donc un abus de langage. La résonance de Fano est en fait une approximation de la courbe autour de la résonance étroite.

Le phénomène de transparence induite par électromagnétisme (EIT) est bien connu dans les systèmes optiques [38] où une interférence entre les chemins de transitions des niveaux

atomiques permet d'obtenir une transparence parfaite. L'analogie pour les systèmes multirésonants est assez direct, il s'agit simplement de deux résonances pouvant être excitées simultanément et dont les amplitudes de transmission sont de même norme, mais hors phase. Pour les systèmes couplés avec un guide d'onde, on peut représenter le guide comme le niveau fondamental et chacune des résonances comme étant un niveau excité du système. La EIT survient donc lorsque deux résonances sont situées proches l'une de l'autre et de caractéristiques similaires. Lorsqu'on compare ce phénomène avec celui des résonances de Fano, il devient alors clair que ce qui est typiquement appelées résonance de Fano et EIT (ou EIT-like) est simplement l'interaction de plusieurs résonances, dans un cas avec des paramètres largement différents alors que dans l'autre cas, les paramètres sont semblables.

2.3.2 Systèmes à pertes

Deux types de pertes peuvent survenir, soit que le chemin direct subit des pertes, donc $\bar{C}$ n'est pas unitaire, soit que la résonance est à perte. Pour le premier cas, les équations (2.28) et (2.29) sont toujours valides, mais il devient impossible de trouver des relations simples entre les termes de couplage et plus particulièrement, la relation $\bar{C} |d\rangle^* = -|d\rangle$ ne peut plus être respectée. Il est également impossible d'ajuster (2.32), puisque cette équation provient de $t = 1$.

Par contre, pour le deuxième cas, on peut facilement ajuster (2.32) pour tenir compte des pertes. Il est possible d'obtenir cet ajustement en ajoutant une contribution des pertes à (2.28) :

$$\frac{d}{dt} |a\rangle = (j\bar{\Omega} - \bar{\gamma} - \bar{\Gamma}) |a\rangle + \bar{K}^T |s_+\rangle \quad (2.37)$$

La transformation des paramètres $\bar{S}$ aux paramètres $\bar{M}$ permet alors d'obtenir la correction :

$$\bar{M} = \prod_j \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j + i\Gamma_j} & -\frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j + i\Gamma_j} \\ \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j + i\Gamma_j} & 1 + \frac{i\gamma_j}{\omega - \omega_j + i\Gamma_j} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Cette formulation permet de mesurer l'effet des pertes sur la transmission. Dans la limite de $\Gamma \rightarrow \infty$, il n'y a plus de résonance possible, la résonance n'accumule plus d'énergie. Pour une résonance isolée, c'est-à-dire loin de toute influence d'autres résonances dans le domaine fréquentiel, la transmission et la réflexion prennent alors leur forme habituelle :

$$|t|^2 = \frac{(\omega - \omega_r)^2}{(\omega - \omega_r)^2 + (\gamma + \Gamma)^2} \quad (2.39)$$

$$|r|^2 = \frac{\gamma^2}{(\omega - \omega_r)^2 + (\gamma + \Gamma)^2} \quad (2.40)$$

Donc, la transmission à résonance est toujours nulle, mais la réflexion du signal devient beaucoup plus faible. Très loin de la fréquence de résonance ($|\omega - \omega_r| \gg (\gamma + \Gamma)$), la transmission devient parfaite puisque aucune énergie n'est couplée sur la résonance.

2.4 Senseurs

Cette section présente très brièvement les senseurs THz et leurs problématiques. Dans un premier temps, on introduira les objectifs des senseurs et leurs métriques habituelles. On présentera ensuite une revue des senseurs récents dans le domaine des THz, pour la mesure de propriétés des couches minces. La section n'abordera pas les mesures faites à partir d'un faisceau libre puisqu'il s'agit de la méthode que l'on souhaite remplacer.

2.4.1 Objectifs et métriques

On appelle senseur tout dispositif dont une propriété mesurable p change avec une quantité à mesurer, Q , tel que :

$$p = f(Q) \quad (2.41)$$

La propriété peut être variée (fréquence de résonance, amplitude de transmission, angle de déflexion, etc.) La quantité aussi peut être variée (indice de réfraction, épaisseur, etc.) On appelle sensibilité, $\mathcal{S}$, la variation de la propriété avec la quantité :

$$\mathcal{S} = \frac{df(Q)}{dQ} \quad (2.42)$$

De façon générale, on cherche habituellement à identifier un changement dans le système, par rapport à une référence. Le point actuel $f(Q)$ est donc souvent peu important. Le système a une précision donnée, $\mathcal{P}(Q)$, soit la mesure la plus fine pouvant être effectuée. La limite de détection du système, $\text{LOD}(Q)$, soit la plus petite mesure de la quantité que l'on cherche à mesurer correspond alors à :

$$\text{LOD}(Q) = \frac{\mathcal{P}(Q)}{\mathcal{S}(Q)} \quad (2.43)$$

La figure de mérite d'un système est habituellement (2.42) puisque $\mathcal{P}(Q)$ est une fonction de l'appareillage du laboratoire effectuant la mesure. Certains auteurs utilisent parfois (2.43) comme figure de mérite, particulièrement pour comparer des techniques mesurant des propriétés différentes pour une même quantité Q .

Il y a de multiples intérêts pour les senseurs dans les fréquences THz. D'abord, le rayonnement THz est non-ionisante et sans danger pour l'humain, ce qui rend l'implémentation des systèmes beaucoup plus simple. Ensuite, la plupart des tissus secs ainsi que des polymères, incluant le polyéthylène couramment utilisé comme emballage, sont transparents. De plus, le rayonnement est fortement absorbée par l'eau ainsi que par la plupart des explosifs. Cette propriété rend certains types de détection faciles. Par exemple, pour déterminer la proportion d'eau contenue dans le papier [39] ou encore pour identifier des explosifs en dessous de vêtements.

2.4.2 Méthodes basées sur l'optique guidée

Une partie des senseurs fonctionnant sur un principe de guidage provient de l'optique ; par exemple, dans [40], les auteurs utilisent une fibre guidant par anti-résonance afin de mesurer l'épaisseur de la couche externe. Puisque cette couche contribue à l'anti-résonance, la fréquence de guidage dépend de l'épaisseur. Ils arrivent à mesurer des épaisseurs en dessous de la longueur d'onde, avec une sensibilité de $0.2 \text{ GHz } \mu\text{m}^{-1}$. Quelques autres senseurs ont été produits en utilisant, par exemple, un coupleur diélectrique 2×2 entre une fibre creuse et un canal nanofluidique [41].

La grande majorité des senseurs utilise un PPWG comme guide d'onde. Le confinement additionnel fourni par ce type de guide d'onde permet d'avoir une bien plus grande sensibilité. Par exemple, dans [42], les auteurs utilisent un PPWG ayant une séparation entre les plaques de $50 \mu\text{m}$ et sont capables de mesurer l'épaisseur d'une couche d'eau de 20 nm , à $\pm 3 \text{ nm}$. L'utilisation d'un guide permet également d'effectuer des études de spectroscopie sur les matériaux [43, 44]. D'ailleurs, les propriétés obtenues lors d'un dépôt sur une surface de métal peuvent être beaucoup mieux contrôlées que lors d'une incorporation simple dans un polymère. La température lors des mesures est également mieux contrôlée, ce qui rend les PPWG supérieurs pour ce type de mesure. Il est également possible de créer des cavités dans un PPWG, avec une rainure dans la direction perpendiculaire à la propagation de l'onde [45, 46]. On obtient alors un senseur en changeant les propriétés résonantes de la cavité en remplissant, par exemple, la rainure d'un liquide. Dans [46], on obtient des sensibilités atteignant 91.25 GHz/RIU à une fréquence de 270 GHz . Il est également possible d'utiliser

des rainures périodiques, à la manière d'un réseau de Bragg, et d'inclure un défaut. Dans ce cas, il est possible de déposer une couche ($\epsilon = 4.67$) sur le guide et de mesurer son épaisseur [47]. La sensibilité peut alors atteindre $2 \text{ GHz } \mu\text{m}^{-1}$.

2.4.3 Méthodes basées sur les métasurfaces

Les senseurs fabriqués à partir de métasurfaces utilisent toujours un système THz-TDS (résolution maximale $\sim 1.5 \text{ GHz}$) muni d'un faisceau libre afin d'effectuer la mesure. La première démonstration pratique d'un tel senseur provient de [30]. Dans cette étude, des SRR ont été déposés sur une surface de $6 \mu\text{m}$ de benzocyclobutane sur 1 mm de Si. Une couche de Si a été rajoutée par dépôt de nanosphères en phase liquide. On note alors un changement de la fréquence de résonance d'environ 10%. La sensibilité correspondante n'a pas été calculée puisque l'épaisseur exacte n'est pas connue, mais la couche ajoutée n'est pas visible en transmission. Une étude similaire a ensuite été effectuée [48], où 50 nm de liquides (H_2O , CH_3OH , CHCl_3) ont été déposés sur des SRR afin de mesurer le changement de fréquence de résonance.

Une étude systématique de la mesure d'épaisseur de couches de photorésine ($\epsilon = 2.7$) déposées sur une métasurface a été réalisée [49]. Parmi les points importants, on note que le système n'est pas sensible à des changements d'épaisseur lorsque la couche dépasse $\sim 20 \mu\text{m}$, alors que la sensibilité pour une épaisseur presque nulle atteint $6.7 \text{ GHz } \mu\text{m}^{-1}$. Le changement de fréquence de résonance provient du changement de capacité du système, l'effet étant limité dans la région près du SRR dû à l'exaltation du champ électrique dans cette région. Un autre problème est que le champ est majoritairement concentré dans les régions à haute permittivité. De ce fait, il est préférable d'utiliser des métamatériaux sur des substrats minces ayant une faible permittivité tel que du Si_3N_4 [50, 51] ou du polyimide [52]. Si les SRR sont déposés sur 400 nm de Si_3N_4 , la sensibilité du dispositif à une épaisseur presque nulle peut alors atteindre $60 \text{ GHz } \mu\text{m}^{-1}$ lorsque de la fibroïne de soie est déposée ($\epsilon = 3.6$) [51]. La hauteur des SRR déposés est également un facteur dans les résultats. Les méthodes de fabrication traditionnelles, utilisant un dépôt par évaporation permettent d'atteindre des épaisseurs typiques de $\sim 200 \text{ nm}$. Dans [53], les auteurs utilisent un faisceau de protons pour obtenir des SRR de $10 \mu\text{m}$ de haut. Ces changements permettent d'obtenir des valeurs totales de changements de fréquence 3 à 4 fois plus grandes que pour les SRR de quelques centaines de nanomètres de haut.

On note qu'il est impossible de comparer directement les sensibilités puisque la permittivité de la couche mesurée est différente, tout comme la forme des SRR. Cette forme peut avoir une

influence considérable sur la réponse, principalement en ce qui concerne le facteur de qualité Q . Pour les SRR symétriques, le facteur de qualité atteint des valeurs typiques de $Q \sim 10$, alors qu'il peut atteindre des valeurs beaucoup plus élevées pour un résonateur asymétrique. Cette hausse du facteur de qualité contribue à une exaltation plus forte du champ et peut faire augmenter la sensibilité, des valeurs de 500 GHz μm^{-1} ayant été calculées pour des modes de très haute qualité, pour une couche ayant $\epsilon = 3.2$ [4].

2.5 Méthode des éléments finis

Cette section présente les particularités de la FEM appliquée aux problèmes électromagnétiques. Il ne s'agit pas d'une explication complète des mathématiques de cette méthode. De manière générale, la FEM cherche à résoudre une équation différentielle quelconque, mais dans ce cas, on cherche à trouver la solution de (2.9), dans une forme faible :

$$\int_V \left(\nabla \times \mu_r^{-1} \nabla \times \vec{E} - k_0^2 \epsilon_r \vec{E} \right) \cdot \vec{v} = 0, \quad (2.44)$$

où $\vec{v}$ est une fonction d'essai. Une des particularités de l'équation (2.44) concerne le choix des variations $\vec{v}$ permises. Les éléments de bord de Nedelec [54, 55] ont été développés pour pallier aux difficultés de satisfaire à (2.44) simultanément à la condition sur la divergence $\nabla \cdot \vec{E} = 0$. Leur utilisation est maintenant considérée comme essentielle dans les calculs par FEM dédiés à l'électromagnétisme [56, 57]. La FEM est une méthode maintenant très populaire dans les calculs électromagnétiques [4, 45, 47, 49, 50]. Les calculs effectués dans le cadre de ce mémoire sont basés sur le logiciel commercial de FEM COMSOL.

On a mentionné dans la section 2.1.2 que l'équation (2.9) pouvait fournir une partie imaginaire à k ou ω . Dans le cadre de la FEM, il existe des différences significatives. Si l'on suppose que k est réel, on peut calculer directement (2.44) en utilisant des conditions de Bloch-Floquet, où le champ d'un côté à l'autre du domaine est dans la forme d'une onde de Bloch ($\sim \exp(-\vec{k} \cdot \vec{r})$) avec k connu et où ω apparaît comme une valeur propre. Cette méthode est déjà implémentée dans COMSOL. Par contre, si l'on cherche à avoir ω purement réel, il faut alors changer légèrement (2.44). On cherche alors à calculer $\vec{u}_k$ plutôt que $\vec{E}_\omega$ et l'équation est alors [58] :

$$\int_V \left(\frac{k^2}{\epsilon} \vec{u} - \frac{\vec{k}}{\epsilon} (\vec{k} \cdot \vec{u}) - i \vec{k} \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{u} \right) - i \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \vec{k} \times \vec{u} \right) + \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{u} \right) - \mu \frac{\omega^2}{c^2} \vec{u} \right) \cdot \vec{v}, \quad (2.45)$$

où $\vec{v}$ est une autre fonction d'essai. La fréquence ω est connue et on cherche les solutions $\vec{k}$. Compte tenu du fonctionnement des ordinateurs qui sont incapables de traiter directement (2.45) dans sa forme vectorielle, on cherche alors $\vec{k} = \vec{k}_0 + \lambda \vec{k}_d$ où λ est la valeur propre, $\vec{k}_0$ un point donné et $\vec{k}_d$ une direction dans le domaine des $\vec{k}$. Cette méthode présente quelques avantages par rapport à (2.44), notamment que les milieux dispersifs, où ϵ est une fonction de ω , peuvent être résolus. Les pertes près d'une résonance peuvent également être calculées sous une forme pratique, en termes de longueur de propagation.

CHAPITRE 3

Article 1. Probing terahertz metamaterials with subwavelength optical fibers

Ce chapitre est la copie de l'article publié dans *Optics Express* en 2013. Il étudie les propriétés optiques en transmission et réflexion lorsqu'une fibre optique sous-longueur d'onde est approchée d'une métasurface du point de vue théorique. Les données sont analysées avec un modèle semi-analytique.

3.1 Authors

Martin Girard, Maksim Skorobogatiy

École Polytechnique de Montréal, Department of Engineering Physics

C.P. 6079, Centre-Ville Montréal, Qc, H3C 3A7, Canada

3.2 Abstract

Transmission through a subwavelength terahertz fiber, which is positioned in parallel to a frequency selective surface, is studied using several finite element tools. Both the band diagram technique and the port-based scattering matrix technique are used to explain the nature of various resonances in the fiber transmission spectrum. First, we observe that spectral positions of most of the transmission peaks in the port-based simulation can be related to the positions of Van Hove singularities in the band diagram of a corresponding infinite periodic system. Moreover, spectral shape of most of the features in the fiber transmission spectrum can be explained by superposition of several Fano-type resonances. We also show that center frequencies and bandwidths of these resonances and, as a consequence, spectral shape of the resulting transmission features can be tuned by varying the fiber-metamaterial separation.

3.3 Introduction

Metamaterials have been extensively studied during the last decade. These artificial materials are built to exhibit behaviors that are normally not found in nature, with the most notable example being negative refractive index materials. Two dimensional metamaterials or Frequency Selective Surfaces (FSSs) have been demonstrated to exhibit novel behavior such as advanced polarization manipulation [59], beam steering [60], invisibility cloak [61] and high-Q terahertz (THz) frequency selection [62, 63], to name a few. Tuning metamaterials by

varying the local or global density of charge carriers [60, 64, 65] has also been demonstrated. One of the enabling geometries that has been thoroughly studied and commonly used in the FSSs is based on the periodic arrays of Split-Ring Resonators (SRRs).

Interrogation of the frequency selective surfaces in THz is mainly performed by sending a THz beam perpendicular to such a surface. Experimentally, interrogation perpendicular to the sample surface is frequently the only option available due to alignment limitations experienced by many THz setups. When interrogating FSS perpendicular to its surface, one is limited with respect to the possible directions of the electric and magnetic fields, which are always located in the plane of a FSS. Despite of all these limitations, many remarkable properties of the FSSs have been demonstrated including coupling between light and dark modes through the use of asymmetry in the metamaterial structure [66]. The optical properties of frequency selective surfaces have been much less studied when the probing light is propagating parallel to the FSS surface. One way to realize such beams in practice is to use optical waveguides suspended parallel to a FSS. One advantage of this arrangement is that the interaction length between THz beam and FSS can be made arbitrarily long (in the absence of material losses). Additionally, one can control polarization of the probing light to realize either magnetic or electric field to be perpendicular to a FSS.

While waveguide-FSS systems have not been yet detailed, at the same time, the waveguide-resonator systems have been extensively studied (see, for example, [67]) and showed to exhibit various exciting phenomena including tuneable Electromagnetic Induced Transparency (EIT)-like transmission [68, 69] and Fano resonances [34]. In fact, it has been shown that EIT-like transmission phenomenon and Fano resonances have essentially the same origin. Namely, transmission spectra corresponding to these phenomena can be understood in terms of the individual properties of several closely spaced (in frequency) resonances using standard considerations of the scattering theory [70]. Moreover, in nanostructures presenting two resonances, EIT-like transmission and superscattering have been shown to be related [71]. It is important to note that many of the modern discussions on the subject of transmission characteristics of the waveguide-resonator systems take roots in the analysis of similar systems in photonic crystals that exhibit many of the same effects [72]. In order to realize EIT and Fano resonances experimentally, one frequently employs single mode waveguides coupled to various resonators such as optical cavities, photonic lattice defects, quantum dots [73], etc. The EIT phenomenon is typically observed when a waveguide is coupled to several slightly detuned resonators. It has also been demonstrated that both the waveguide-resonator coupling strength, as well as phase can be used to tune the EIT resonances [74].

Many potential applications of metamaterials envision their use as point devices. Currently, one assumes that, first, light is delivered by some means to the metamaterial location, then, light interrogates the metamaterial-based device, and finally, the transmitted or reflected light is analyzed at the device location. In practical applications, however, it is more convenient to use waveguides to get the light in and out of the point devices. This not only allows a convenient remote excitation and analysis of the transmitted light, but it also allows reliable and, potentially, tuneable coupling of light in and out of a device. A key component of the integrated optics that enables this integration concept is a low-loss waveguide. Unfortunately, in the THz spectral range, development of the low-loss, low-dispersion waveguides that allow efficient excitation using standard THz sources proved to be a challenging task. As one potential solution, our group has recently demonstrated a variety of subwavelength polymer-based low-loss fibers that can deliver THz power over long distances (meters) [7]. The next natural question for us is whether such fibers can be used to realize a complete THz fiber-based system that enables light delivery, device interrogation, and remote light analysis similarly to the systems developed in the near-IR spectral range [75, 76].

In this work, we study the use of subwavelength terahertz fibers as light delivery and interrogation platform for operation with metamaterial-based point devices. Particularly, we study a subwavelength fiber that is placed parallel to the frequency selective surface. Thus defined coupler mostly operates in a strong coupling regime as evanescent fields of the subwavelength fiber show strong presence outside of the fiber core. We note also that different polarization states can be realized in this arrangement with electric field either parallel or perpendicular to the metamaterial surface depending on polarization of the fiber mode. Additionally, given the large sizes of THz fiber and split ring resonators (hundreds of microns), a tunable coupling between metamaterial and fiber can be easily achieved by mechanical actuation, thus opening a way for active device applications such as frequency scanning, switching and dynamic filtering. To the best of our knowledge, it is the first time that such subwavelength fiber-metamaterial couplers are studied.

The paper is organized as follows. First, we detail geometry of the fiber-FSS coupler considered in this work, and then we detail numerical approaches used in our simulations. Second, we summarize predictions of a scattering theory for the forms of transmission curves in the presence of several resonances. These considerations will be used in the following chapters to explain the results of our simulations. Third, for an infinite fiber-FSS structure we present the corresponding band diagram calculated using a supercell approximation. Fourth, we study transmission through the fiber suspended over a single period (along the fiber length) of a

FSS. Particularly we investigate the effect of supercell transverse size and material losses on the fiber transmission spectrum. Fifth, using a particular supercell we show that spectral properties of the resonant features in the fiber transmission spectrum are tunable by varying the fiber-FSS distance. Changes in the resonant features as a function of the fiber-FSS distance are then interpreted quantitatively using the line shapes from the scattering theory. Finally, we investigate convergence in the fiber transmission properties when increasing the number of metamaterial periods along the fiber length. In this regime, we see good correspondence between results of the transmission calculations and predictions of the band diagram calculations. Particularly, positions of the Van Hove singularities, as detected from the structure of a band diagram, correspond exactly to the positions of resonances in the transmission calculations. Additionally, we observe convergence in the peak spectral widths when increasing the number of metamaterial periods.

3.4 Geometry of a fiber-metamaterial coupler

In this work we perform two types of calculations. First, we compute the band diagram corresponding to an infinite periodic system consisting of a fiber suspended in parallel to the metamaterial. Second, we conduct scattering matrix transmission simulations with two ports, where we assume a finite number of periods in a coupler. Schematic of a supercell used in our simulations is presented in Fig. 3.1. There, the air-clad fiber has radius $R = 200 \mu\text{m}$ and it is made of a polymer with refractive index $n = 1.55$. The fiber is suspended over the metamaterial at a distance H . The metamaterial is built on a $700 \mu\text{m}$ – thick fused silica substrate with refractive index $n = 1.966$. The substrate is patterned with split ring resonators made of perfect electrical conductor with height $h = 50 \mu\text{m}$. The period of the metamaterial cell is $\Lambda = 400 \mu\text{m}$. Finally, for each simulation presented in this work we specify the number of SRRs in the transverse direction N_t , as well as the number of SRRs in the longitudinal direction N_l .

COMSOL finite element software is used in all our calculations. The direction of wave propagation is along the $\mathbf{y}$ axis. Along this axis we either use the Floquet boundary condition for the band diagram calculation, or the port boundary condition for the transmission calculations. In the direction normal to the plane of FSS ($\mathbf{z}$ axis) a $6000 \mu\text{m}$ air gap is added above the substrate as well as $2000 \mu\text{m}$ air gap is added below the substrate. In $\mathbf{z}$ direction, the unit cell is terminated with the PML boundary conditions. The periodic boundary condition is applied in the transverse $\mathbf{x}$ direction, in order to simulate an infinitely wide metamaterial.

In the case of transmission calculations we use the port boundary conditions. Both at the input port (a source waveguide) and at the output port (an outgoing waveguide) we

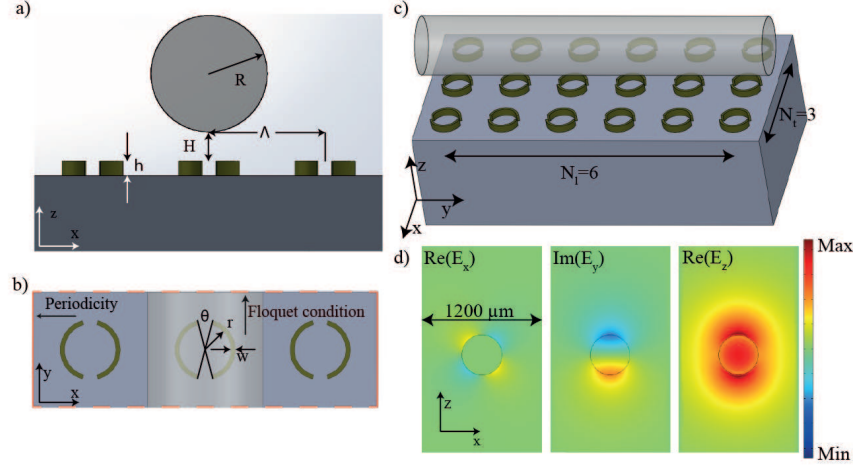


Figure 3.1 Schematic of a unit cell used in simulations. a) side view, b) top view. Unless stated otherwise $R = 200 \mu\text{m}$, $h = 50 \mu\text{m}$, $\Lambda = 400 \mu\text{m}$, $\theta = 30^\circ$, $w = 15 \mu\text{m}$ and $r = 90 \mu\text{m}$. c) 3D rendering of a fiber-FSS system featuring 3 transverse and 6 longitudinal periods. d) Linearly polarized (along $\mathbf{z}$) fundamental HE_{11} mode of a single mode fiber is used as a port condition.

take into consideration only one guided mode which is the fundamental mode of a single-mode fiber polarized in the direction perpendicular to the metamaterial surface (the leading component of the modal electric field is E_z , see Fig. 3.1(d)). As a consequence, the minor E_x component of the modal electric field is antisymmetric in the $\mathbf{x}$ direction, which, in principal, can result in conflicting boundary conditions at the supercell boundary where we impose periodic boundary conditions. To prevent this from happening, the HE_{11} modal fields (that constitute port boundary conditions) are somewhat modified to go to zero at the periodic boundaries.

We note that a certain caution has to be exercised when using periodic boundary conditions. Particularly, the width of the supercell has to be wide enough to prevent significant overlap of the fiber mode with that of an image fiber created by the periodic boundary conditions. In our simulations we observe that periodic boundary conditions do not affect strongly the system response at higher frequencies ($f > 250 \text{ GHz}$) when at least 3 SRRs are used in the transverse direction. At lower frequencies, transverse modal fields of the fundamental mode of a subwavelength fiber show very slow logarithmic decay [10] outside of the fiber core. Therefore, at such frequencies computational artifacts could be introduced due to coupling between the subwavelength fiber and its images. Finally, we note that in practical implementations of the THz metamaterials the height h of the split ring resonators is much smaller than the one

used in our simulations, and it is typically on the order of several microns. However, using such a small height is impractical even if finite element solver is used as such thin layers result in the intractable number of elements. For example, when performing transmission calculation using a unit cell consisting of only a single row of 3 SRRs, $50 \cdot 10^3$ elements are generated (6.4 GB) when $h = 50 \mu\text{m}$, whereas $135 \cdot 10^3$ elements (17 GB) are generated when $h = 5 \mu\text{m}$. A major problem arises when modeling longer systems. Thus, for $h = 50 \mu\text{m}$ and a 10 period-long supercell (total of 30 SRRs), 70 GB of memory and 40 minutes are required per single frequency calculation. Therefore, with 128 GB of memory and $h = 50 \mu\text{m}$ we are limited by 11 periods (33 SRRs).

3.5 Band diagram of the fiber-metamaterial coupler

First, we present the results of band diagram calculations. In Fig. 3.2 we show dispersion relations of the modes of an infinitely periodic fiber-metamaterial coupler (periodicity along the fiber direction). The unit cell used in the simulations (see Fig. 3.1(a)) features three SRR in the transverse direction $N_t = 3$, and a single SRR in the longitudinal direction. Fiber-metamaterial separation is $h = 50 \mu\text{m}$. Floquet boundary conditions are used at the supercell boundaries terminating the fiber. The band diagram of an infinitely periodic fiber-metamaterial system is presented in Fig. 3.2(b). To show the effect of split ring resonators, we have repeated simulation by keeping exactly the same geometry, however, without the SRRs on the slab surface (see Fig. 3.2(a)). For the ease of comparison, resultant band diagram is presented within the same first Brillouin zone as in the case of a fiber-metamaterial system. The color code reflects the average value of the norm of a $\mathbf{y}$ component of a Poynting vector taken over the volume of the fiber to the root mean square of the electric field in the whole computational cell. Thus, the blue color corresponds to low fraction of the modal fields in the fiber, while the red color corresponds to strong presence of the modal fields in the fiber.

As it is well known from the theory of circular step-index fibers, their fundamental HE_{11} mode is doubly degenerate. When bringing a planar silica substrate into the fiber vicinity, this degeneracy is lifted and the fiber modes can then be characterized as predominantly $\mathbf{x}$ or $\mathbf{z}$ polarized depending on the leading transverse component of their electric fields. The perturbation seen by the subwavelength fiber is very strong due to a significant presence of its fields in the metamaterial substrate region. The fundamental HE_{11} mode of an unperturbed fiber is, thus, absent from Fig. 3.2 and is replaced by the two slab-fiber supermodes. Moreover, fiber modes and slab modes can show strong hybridization in the vicinity of phase matching points, which results in standard avoiding crossing behavior of the modal dispersion relations (see a part of Fig. 3.2(a) within a large circle). For small fiber-slab separations, coupling

between the modes of a fiber and a slab can be very strong, thus resulting in significant changes in the curvature of the dispersion relations of the hybrid modes in the vicinity of a phase matching point. This, in turn, leads to the high values of the group velocity dispersion of the hybrid modes. It is important to note from Fig. 3.2(a) that accidental crossing of the fiber and slab modes does not necessarily lead to avoiding crossing phenomenon or modal hybridization. In fact, when symmetries of the fiber and slab modes are not compatible this results in zero coupling strength, thus, no hybridization between the two modes occurs.

The introduction of the SRRs brings two important modifications to the structure of the band diagram. The first one is manifested by the SRR-induced interactions between otherwise non-interacting fiber and slab modes or the two slab modes characterized by the incompatible symmetries. The effect of such an induced interaction is most pronounced when the dispersion relation of one of the modes is folded back into the first Brillouin zone (see four regions in Figs. 3.2(a) and 3.2(b) within small circles). In this case, at a phase matching point the slopes of the two dispersion relations have opposite signs, and, therefore, the result of the interaction is in the opening of a local bandgap.

Note that due to periodic boundary conditions in the transverse direction, the band diagrams presented in Fig. 3.2 are calculated along the line of high symmetry defined by $k_x = 0$. This means that in the vicinity of the edges of local bandgaps, the full dispersion relation of the allowed optical states is of either a parabolic or hyperbolic form $\omega = \omega_0 + Ak_y^2 + B(k_x - k_x^0)^2$. Consequently, at frequencies corresponding to the edges of the local bandgaps (see insert of Fig. 3.2(b)) one expects appearance of the Van Hove singularities in the local density of states (see chapter 6.4 in [64], for example). As we will show in the following sections, the spectral position of the resonant features in the fiber transmission spectrum coincide with positions of the Van Hove singularities as determined from the fiber-metamaterial band diagram. This establishes the fundamental relation between the fiber transmission and band diagram calculations. The second impact of the introduction of SRRs is the appearance of slow light bands characterized by flat dispersion relations (region of Fig. 3.2(b) within the dashed ellipse).

3.6 Scattering theory

In the remaining sections we perform fiber transmission simulations using port boundary conditions. In our interpretation of the resonant features in the fiber transmission spectrum we use scattering theory formulation presented in [70], as well as results of the band diagram calculations presented in the previous section. The scattering theory considers interaction of a waveguide guided mode with a certain number of discrete resonator states. In our case, the

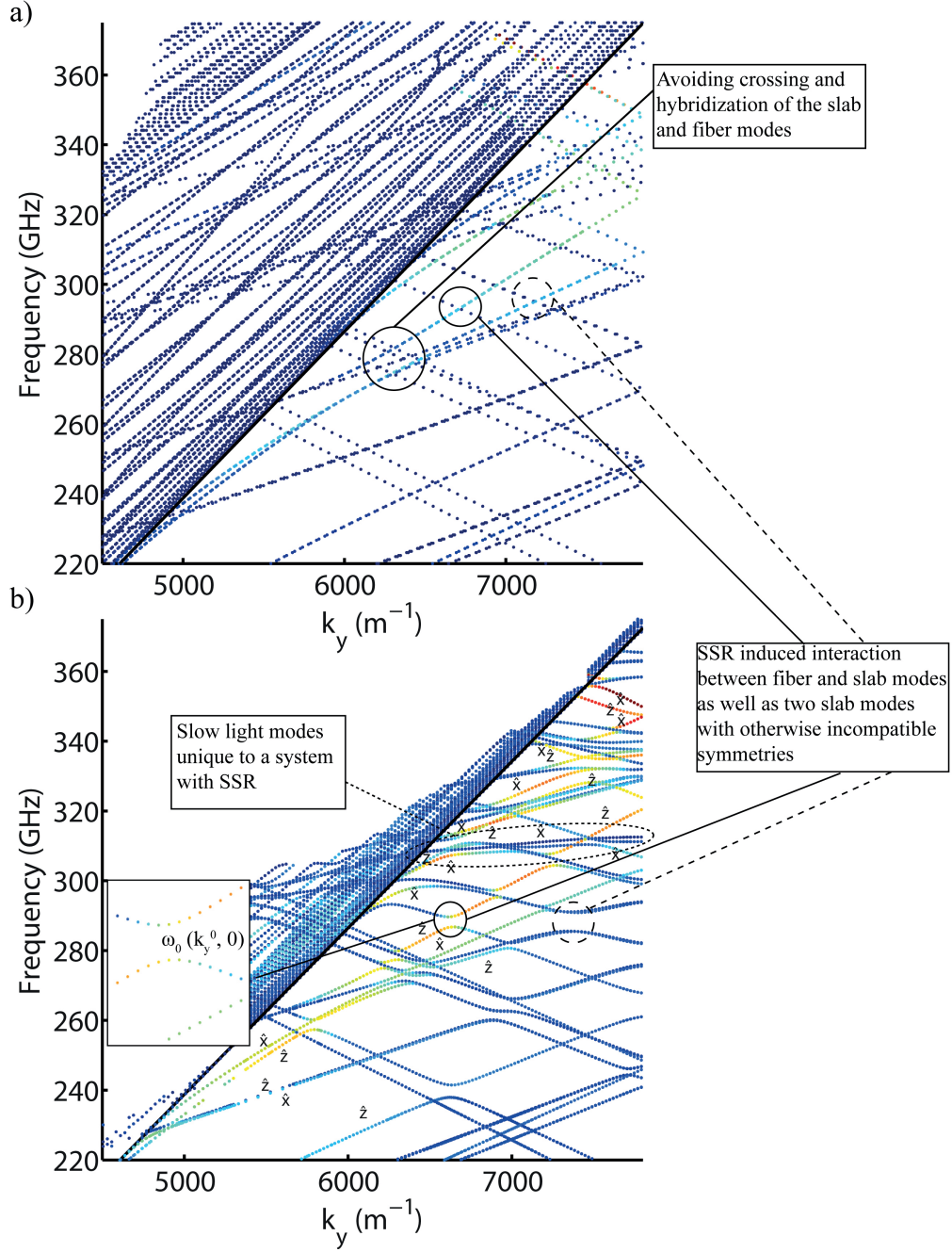


Figure 3.2 Band diagrams for a) fiber-slab system without SRRs, b) fiber-metamaterial system with SRRs. Polarization of some of the modes is indicated as $\hat{x}$, or $\hat{z}$ depending on the leading component of the electric field. Color for each optical state indicates the degree of field localization in the fiber core region.

guided mode is the fundamental mode of the subwavelength fiber used by the port boundary conditions. At the same time, the discrete resonator states are the hybridized modes of a fiber-metamaterial system in the vicinity of Van Hove singularities. Note from Fig. 3.2(b) that Van

Hove singularities usually come in pairs as they are the result of anticrossing between two modal dispersion relations with different slope signs. Therefore, in the transmission spectrum we expect to see various line shapes that are formed by a pair of resonances.

In the lossless system, scattering theory predicts that the frequency dependent transmission coefficient through the fiber $t(f)$ can be cast in terms of the frequency dependent total scattering crosssection $\sigma_t(f)$ as :

$$|t(f)|^2 = \frac{\sigma_t^2}{1 + \sigma_t^2} \quad (3.1)$$

In turn, σ_t can be calculated using contributions from the scattering crosssections σ_i of the individual resonances :

$$\sigma_t(f)^{-1} = \sum_j \sigma_j(f)^{-1} \quad (3.2)$$

which in the lossless case are :

$$\sigma_j(f) = (f - f_j) / \gamma_j \quad (3.3)$$

where f_j is a resonance center frequency, and γ_j is the coupling strength between the resonator mode and a guided mode of a waveguide. In our case, resonant frequencies are determined by spectral positions of the Van Hove singularities. In the limit of weak coupling between the fiber and metamaterials modes, Van Hove singularities are found in the region of avoiding crossing between dispersion relation of a fiber mode and dispersion relation of a particular slab mode that was folded back into the first Brillouin zone due to its interaction with a periodic SRR array.

Expressions (3.1)-(3.3) are found by using a lossless transfer matrix formulation that is a result of solution of a system of coupled differential equations that describe changes in the time dependent intensities of the localized resonator states due to their coupling (leakage) into the guided state of a waveguide. In a more general case when resonator states are lossy, solution for the frequency dependent transmission $t(f)$ and reflection $r(f)$ coefficients can be found by resolving a generalized transfer matrix formulation after introduction of the loss parameter Γ , which is the rate of decay of the resonator state to absorption and far field radiation. Particularly, for a system of N_r localized lossy resonator states coupled to a guided mode, the transfer matrix method [77] requires resolution of the following equation :

$$\begin{pmatrix} t(f) \\ 0 \end{pmatrix} = M(f) \begin{pmatrix} 1 \\ r(f) \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

where the transfer matrix $M(f)$ is defined as :

$$T = \prod_{j=1}^{N_r} \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} & -\frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} \\ \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} & 1 + \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

For a single lossy resonant state coupled to a guided fiber mode, the power transmission coefficient and total losses can be calculated by solving (3.4) using (3.5) to find :

$$|t|^2(f) = \frac{(f - f_0)^2 + \Gamma^2}{(f - f_0)^2 + (\gamma + \Gamma)^2} \quad (3.6)$$

which defines a resonant dip in the transmission spectrum. In the lossless limit $\Gamma = 0$ the dip is complete and transmission is exactly zero at the resonant frequency. From expression (3.6) it also follows that in the immediate vicinity of the resonance frequency $|f - f_0| \ll \gamma$, and in the limit of low loss (or strong coupling) $\Gamma \ll \gamma$, transmission through the waveguide is :

$$|t|_{\min}^2 \approx \Gamma^2 / \gamma^2 \quad (3.7)$$

We will use this important result later in the paper to explain changes in the transmission spectrum in the presence of losses.

Another important case is the interaction between two resonances that lead to the appearance of several well-known line shapes such as EIT-like resonances and non-symmetric Fano line shapes, which we observe in the fiber-FSS transmission spectrum. The abovementioned line shapes manifest themselves as one or two spectral dips that are positioned closely to a single transmission peak. For completeness of presentation, the general form of the transmission coefficient in the presence of two lossy resonances can be found from (3.4) and (3.5) to be :

$$t(f) = \frac{(f - f_1 + i\Gamma_1)(f - f_2 + i\Gamma_2)}{(f - f_1 + i(\Gamma_1 + \gamma_1))(f - f_2 + i(\Gamma_2 + \gamma_2)) + \gamma_1\gamma_2} \quad (3.8)$$

There are two particular cases that we consider in more details. Firstly, we discuss EIT-like line shape resulting when two almost degenerate (in frequency) resonator states are coupled to the guided fiber mode. In this case, one observes two transmission dips and a transmission peak in the middle between the dips. Secondly, in the case of two well separated

resonances, when one of the resonances is broad, and the other one is narrow ($|f_1 - f_2| \sim \gamma_1$, $\gamma_1 \ll \gamma_2$), one observes a non-symmetric Fano line shape characterized by a transmission dip followed by the transmission peak. The corresponding physical phenomenon where such transmission spectrum is frequently observed is when a localized state (in our case a particular metamaterial-bound mode phase matched with a fiber mode) is competing with a continuum of states (all the other metamaterial-bound modes that are not phase matched at resonance with a fiber mode).

In general, for a system of two resonances, in the limit of low loss (or strong coupling) $\Gamma_1 \ll \gamma_1$, $\Gamma_2 \ll \gamma_2$ the maximal value (peak value) of the transmission coefficient can be derived from (3.4),(3.5) to be :

$$|t|_{max}^2 \approx 1 - 2 \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)^2}{(f_1 - f_2)^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\gamma_1} + \frac{\Gamma_2}{\gamma_2} \right) \quad (3.9)$$

At the same time, one can show that transmission amplitudes corresponding to the two dips are similar to those given by expression (3.7), namely :

$$|t|_{min,1,2}^2 = \Gamma_{1,2}/\gamma_{1,2} \quad (3.10)$$

From Eqs. (3.7) and (3.9), we can deduce two interesting properties of the dips (minima) and peaks (maxima) in the fiber transmission spectrum. Firstly, when introducing small losses into a system, $\Gamma \ll \gamma$, transmission peaks will be lost first before the dips. This is a simple manifestation of the fact that decrease of the peak amplitude (see Eq. (3.9)) is linear with a small parameter Γ/γ , while increase in the dip amplitude is much slower, and it is, in fact, quadratic (see Eq. (3.7)) with the same small parameter. Secondly, when increasing losses, high-Q features (resonances with smaller γ values) will be lost first. This is because both dips (3.7) and peaks (3.9) are polynomial functions of a small parameter Γ/γ . Therefore, for the same value of loss, the value of a small parameter will be larger for resonances with higher Q factors. As follows from (3.7) and (3.9), this also means that peak and dip amplitudes corresponding to higher-Q features will disappear faster than those corresponding to the lower-Q features. Note that to arrive to this conclusion we have to assume in (3.9) that the spacing between two resonances is comparable or larger than their total bandwidth, which is actually always the case in our simulations.

Finally, we would like to talk more about Fano line shapes as these are the most frequently encountered spectral features in our simulations. Fano line shapes are typically obtained in a two resonance system where one resonance (characterized by γ_1) is broad (to represent

a continuum of states), and the other one (characterized by γ_2) is narrow (to represent a discrete state). We also assume that the narrow resonance is placed within the bandwidth of a broad resonance so that $|f_1 - f_2| \sim (\gamma_1 + \gamma_2)$. In this case, in the vicinity of a narrow resonance, one typically describes the Fano line shape as :

$$|t|^2(f) = \frac{1}{1 + q^2} \frac{(q\Gamma_\Phi + f - f_\Phi)^2}{\Gamma_\Phi^2 + (f - f_\Phi)^2} \quad (3.11)$$

where q is the Fano asymmetry parameter, f_Φ is the Fano resonant frequency, and Γ_Φ is Fano width. Assuming lossless resonances $\Gamma_{1,2} = 0$, we can expand (3.8) in power series around the point of minimal transmission ($f = f_2$) and match (3.8) and (3.11) up to the third order in $(f - f_2)$ and $(f - f_\Phi + q\Gamma_\Phi)$, yielding the following relations between the Fano parameters and the parameters of the individual resonances :

$$q = \frac{\gamma_1}{f_1 - f_2}, \Gamma_\Phi = \frac{\gamma_2}{1 + q^2}, f_\Phi = f_2 + q\Gamma_\Phi \quad (3.12)$$

Note that the frequencies of the minimal and maximal transmissions are respectively $f_{min} = f_2$ and $f_{max} = f_2 + (q + q^{-1})\Gamma_\Phi$.

3.7 Convergence of a supercell approximation

Before we present main results of the transmission calculations using port boundary conditions, we would like to comment on the accuracy of the supercell approximation used in our simulations. In the rest of this section we vary the number of SRRs in the transverse direction (perpendicular to the fiber) $N_t = [3, 9, 15]$, while using only one SRR along the fiber length $N_l = 1$ (see Fig. 3.3(a)). Transmission through various fiber-FSS supercells are shown in Fig. 3.3(b), where curves of different color correspond to different number of SRRs in the transverse direction. When comparing the transmission curves for supercells containing 3 and 9 SRRs we note that while many of the broader resonant features are present in both curves, their spectral positions are somewhat different. Moreover, the number of narrow peaks for a wider supercell is considerably larger than the number of peaks for a narrower supercell. When further increasing the width of a supercell to $N_t = 15$ (see Fig. 3.3(c)), one observes that position and shape of many broader peaks do not change, thus indicating convergence of these spectral features, while at the same time, many more narrow peaks appear in the spectrum.

We note that, generally, the supercell approximation is most effective when studying the defect states or localized modes that have rapidly decaying fields in the direction of the supercell boundary. Ideally, such localized states have to be located inside of a spectral bandgap

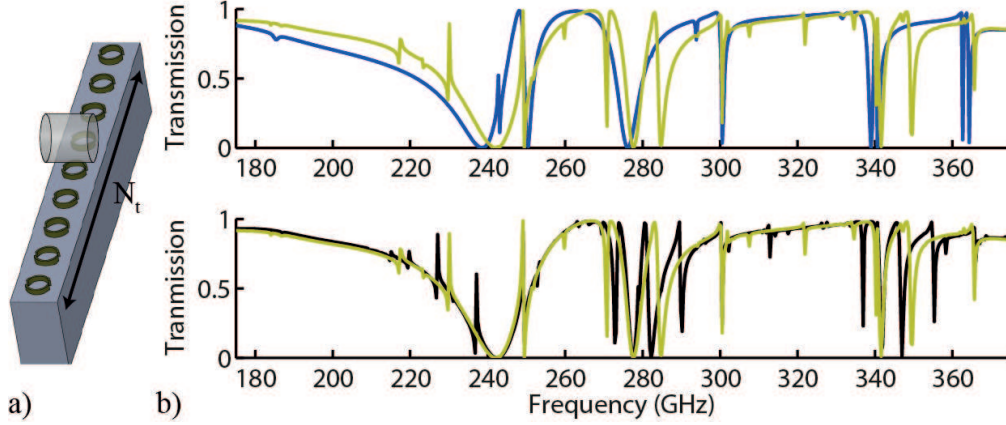


Figure 3.3 (a) 3D rendering of a supercell used in simulation with $N_t = 9$ SRRs in the transverse direction and a single period in the longitudinal direction. (b) Transmission through supercells of different width, $N_t = 3$ (blue), $N_t = 9$ (yellow) and $N_t = 15$ (black)

so they can be clearly distinguished from the continuum of delocalized states. In our case, however, the defect modes (the ones with a considerable power guided in the fiber) are, in fact, strongly hybridized with the metamaterial modes that are extended over the whole supercell in the transverse direction. When increasing the number of SRRs in the transverse direction, a periodic structure is formed in that direction with a period equal to the width of a supercell. Due to periodic boundary conditions, all the states with transverse wavevectors $k_x \sim 2\pi n/(\Lambda \cdot N_t), n \in \text{Integers}$ will contribute to the transmission spectrum. Therefore, the wider is the supercell, the more delocalized transverse modes will contribute to the transmission spectrum. This can be clearly seen from Fig. 3.3(b) when counting the number of resonance peaks for supercells with sizes $N_t = 3, 9, 15$. From this data it is clear that the number of resonant peaks is proportional to the supercell size. Based on these observations, one would wonder in what sense do these transmission results converge when increasing the width of a supercell, or how do these results relate to experimental measurements.

In fact, convergence of a supercell approximation is easy to observe when introducing material losses into the system. In this case, the hybridized fiber-metamaterial modes become evanescent in the transverse direction and, therefore, their properties converge when the supercell size becomes larger than the transverse decay length of the modal fields. Moreover, in the presence of loss, no new resonant features can form in the transmission spectra when increasing the supercell size beyond a certain value. This is because resonances are formed due to constructive interference of the two counter propagating transverse modes of a metamaterial. Therefore, if the supercell size becomes wider than a characteristic transverse decay length of a metamaterial mode, then no interference is possible, therefore, no new resonant

feature can form in the transmission spectrum.

To validate these conclusions, we compare in Fig. 3.4 the transmission spectra calculated for the supercells of two different widths $N_t = 9$ and $N_t = 15$ in the presence of losses. First, we note that in the absence of loss (Fig. 3.4(a)), while there is an overall correspondence between the positions and shapes of the wider resonances, there is clearly no such correspondence for narrow resonances. When introducing material losses for the substrate material into simulations (dashed curves) we observe that sharp peaks rapidly disappear when increasing material losses, while the positions and the widths of the broader peaks remain the same independently of the supercell size. This disappearance of the sharp features is consistent with our predictions from the classic scattering theory (see Eq. (9), and discussions of section 4). In our simulations in Fig. 3.4 we have used $0.02i$ (Fig. 3.4(b)) and $0.2i$ (Fig. 3.4(a)) for imaginary parts of the substrate permittivity, which correspond approximately to 1 cm^{-1} and 10 cm^{-1} bulk material losses of the fused silica and other typical glasses.

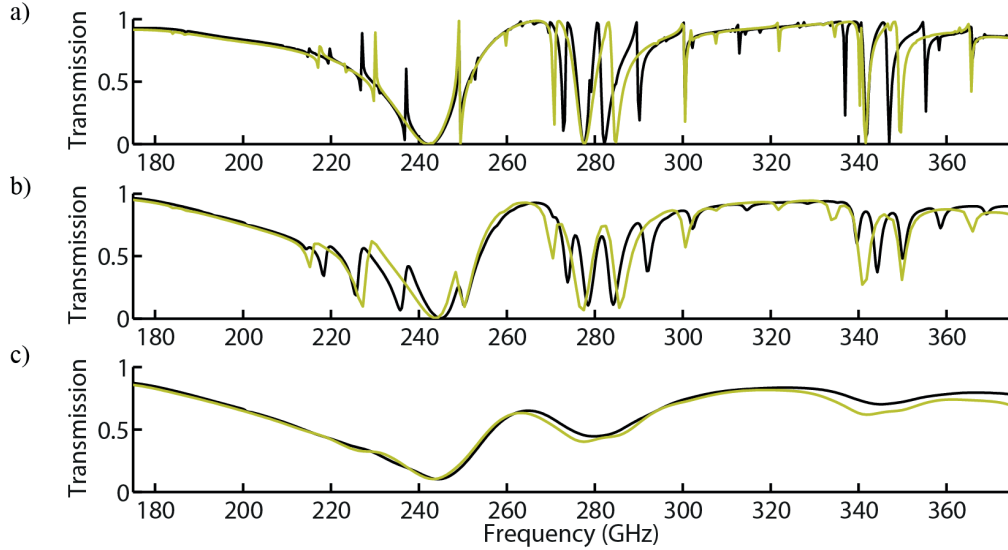


Figure 3.4 Transmission through supercells of different width $N_t = 9$ (yellow) and $N_t = 15$ (black) for different values of the substrate material loss (a) no loss, (b) $Im(\epsilon) = 0.02i$, and (c) $Im(\epsilon) = 0.2i$.

3.8 Effect of the fiber-metamaterial separation on transmission spectrum

We now study the effect of fiber-metamaterial separation on the fiber transmission spectrum. By changing fiber-metmaterial separation one controls the coupling strength between the fiber mode and the metamaterial-bound modes. When using standard Coupled Mode

Theory (CMT) [36], one finds that the coupling strength between two modes (γ parameter in section 3.6) is proportional to the overlap integral between their fields. Moreover, the stronger is the coupling strength between the modes, the wider will be the corresponding resonance in the fiber transmission spectrum. Additionally, in the case of strong coupling, spectral position of the resonant peak becomes dependent on the coupling strength. This is known as coupling-induced frequency shift (CIFS), which had been previously reported in the waveguide-resonator systems [78]. It is, therefore, expected that the resonant features in the fiber transmission spectrum could be tuned by changing the fiber-metamaterial distance H .

To demonstrate the impact of fiber-metamaterial separation on the shape and position of the resonances, in Fig. 3.5 we present several fiber transmission spectra calculated for different values of H in the range of 10-130 μm . The system under study contains $N_t = 3$ SRRs in the transverse direction, and one row of SRRs in the longitudinal direction $N_l = 1$. In these calculations, all the materials were considered as lossless. Consider in particular two broad resonances at ~ 238 GHz and ~ 250 GHz that correspond to two metamaterial modes that are strongly coupled to the fiber mode. As expected, the resonances are broader for smaller fiber-metmaterial separations due to enhanced coupling. Moreover, for these two resonances, their resonant frequencies (frequencies of zero transmission) depend strongly on H due to coupling-induced frequency shift effect. This is especially pronounced for a wider resonance at ~ 238 GHz as the coupling strength for this resonance is the strongest among all the resonances presented in Fig. 3.5. This finding is consistent with the study of CIFS reported in [78], where the authors have concluded that the shift in the resonance position is inversely proportional to the Q-factor of the resonance.

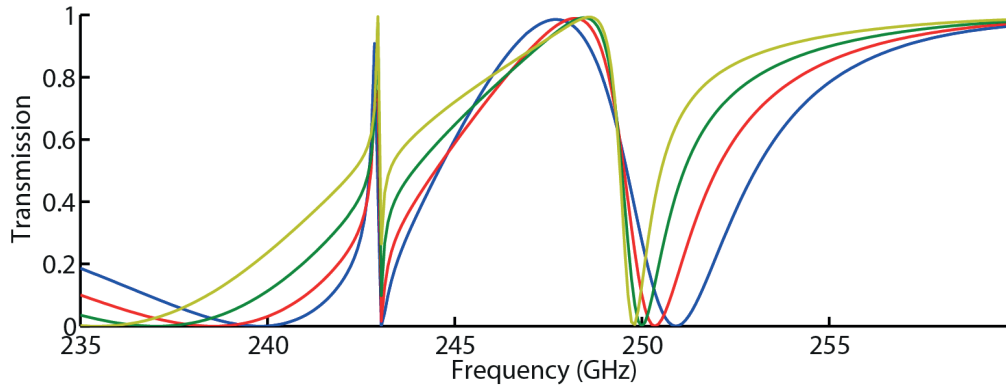


Figure 3.5 Transmission through a fiber-metamaterial system $N_t = 3$, $N_l = 1$, for various fiber-metamaterial separations $H = 10 \mu\text{m}$ (blue), $H = 50 \mu\text{m}$ (red), $H = 90 \mu\text{m}$ (green) and $H = 130 \mu\text{m}$ (yellow).

We now consider in more details, how the resonant position and the resonant width change with the fiber-metamaterial distance. As we have noted earlier, in the weak coupling limit, resonances in the fiber transmission spectrum are typically observed at the phase matching point between the fiber mode and a particular metamaterial mode. Resonance width in this case is proportional to the coupling strength between the two modes, while the coupling strength is proportional to the overlap integral between two interacting modes [36]. The fields of a subwavelength fiber mode show logarithmic decay outside the fiber, while the metamaterial modes are well confined and show exponential decay outside of metamaterial. Therefore, one expects that overlap integral, and, consequently, coupling strength should decrease exponentially fast with H . This means that the resonance position f_r (point of zero transmission) and the resonance width γ_r , could be fitted as follows :

$$\begin{aligned} f_r(H) &= f_0 + \Delta f_r \exp(-H/H_f) \\ \gamma_r(H) &= \Delta \gamma_r \exp(-H/H_\gamma) \end{aligned} \quad (3.13)$$

where f_0 the resonant frequency in the limit of zero coupling, Δf_r is the tuning range of the peak position, $\Delta \gamma_r$ is the tuning range of the resonance width, while H_f and H_γ are the characteristic fiber-metamaterial separations required for tuning.

As an example, in Fig. 3.6(a) we study dependence of the transmission spectrum corresponding to the resonance located at ~ 240 GHz on the values of fiber-metamaterial separation H . Position of the resonant frequency $f_r(H)$ and peak bandwidth $\gamma_r(H)$ are extracted from the transmission spectra by fitting them with (3.4), (3.5), while using three lossless resonances $\Gamma_{1,2,3} = 0$. Resultant values for the peak bandwidth and the peak position (presented as circles in Fig. 3.6(b)) are then fitted with the analytical dependencies (3.13) to give $f_0 = 215$ GHz, $\Delta f_r = 25$ GHz, $H_f = 555 \mu\text{m}$ for the resonance position, and $\Delta \gamma_r = 13.5$ GHz $H_\gamma = 838 \mu\text{m}$ for the resonance width. Overall, the agreement between numerical results and analytical fit is excellent, except for the values of the peak width in the limit of small fiber-metamaterial separations $H < 125 \mu\text{m}$. In fact, at these small values of separation, the broad peak shifts too close to the sharp peak at 243 GHz. As a consequence, there is significant interaction between the two resonant modes and, as a consequence, simple model (3.13) becomes inadequate in this regime.

It is also interesting to comment on the modal field distribution at the frequencies of the minimal and maximal transmission. Particularly, in Figs. 3.6(c) and 3.6(d), we present the logarithm of the $|E_z|$ field distribution in the $\mathbf{y} - \mathbf{z}$ plane for a separation distance of $H = 50 \mu\text{m}$ at the frequencies of minimal transmission ($f = 238.4$ GHz) and maximal

transmission ($f = 242.9$ GHz). The imaging plane goes through the fiber center, therefore, in Figs 3.6 (c) and 3.6(d) we see the fiber core (on the top) suspended over the metamaterial substrate (in the middle of the Fig.) with a single SRR positioned between the two. It is clear from Fig. 3.6(c) that in the case of zero transmission, the power launched into the fiber through the input port (left side of the Fig.) is transferred completely into the metamaterial substrate by the time it arrives to the output port (right side of the Fig.). The field in the metamaterial substrate has a very small overlap with the mode of the output port, therefore, one detects minimum in the fiber transmission. On the other hand, in the case of a perfect transmission (see Fig. 3.6(d)), the power launched into the fiber at the input port is first transferred into the metamaterial substrate and then back into the fiber by the time it arrives to the output port, therefore, one detects maximum in the fiber transmission.

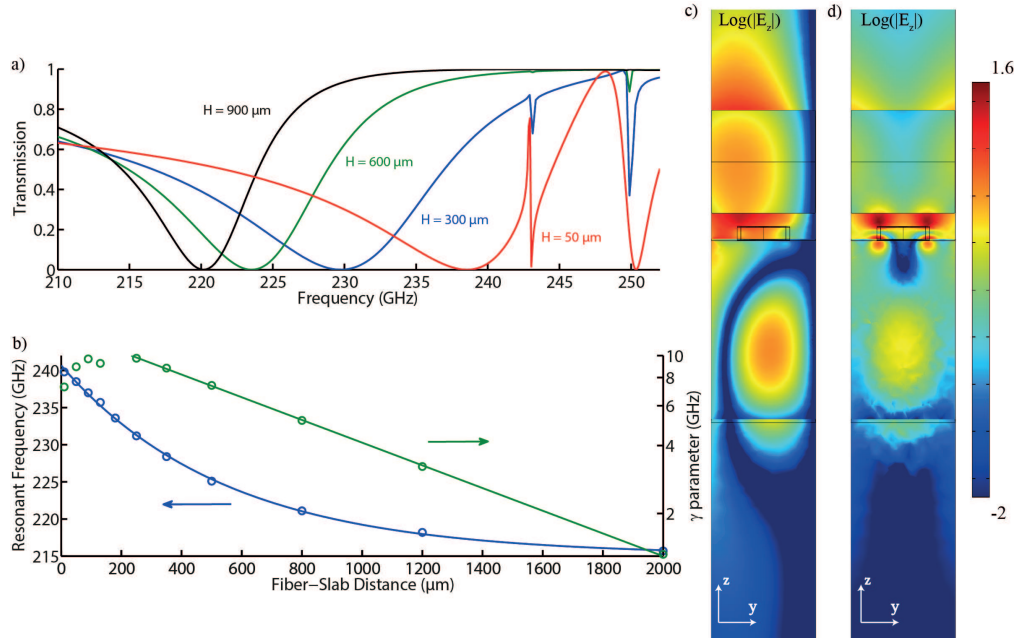


Figure 3.6 (a) Changes in the transmission peak located at ~ 240 GHz as a function of the fiber-metamaterial separation H . (b) Changes in the peak position (zero transmission) and peak width are fitted very well with exponential dependence on H . (c) Electric field distribution at the frequency of zero transmission, and (d) at the frequency of maximal transmission

3.9 Effect of the fiber-material coupling length on transmission spectrum

In this section we investigate changes in the transmission spectra of a fiber-metamaterial system when changing the number of SRRs along the fiber direction. Particularly, we consider metamaterial containing $N_t = 3$ SRRs in the transverse direction, while in the longitudinal

direction we vary the number of SRR periods from $N_l = 1$ to $N_l = 11$. When increasing the number of SRR periods, the response of a finite-size metamaterial should eventually converge to that of an infinitely long periodic system. Therefore, we expect that in the limit or large N_l , there should be a direct correspondence between the band diagram structure (see Fig. 3.3) and the transmission spectra.

In Fig. 3.7 we present transmission spectra of a long fiber-metamaterial system with $N_l = 10$ periods. We note that the spectrum in Fig. 3.7 is calculated with resolution of 0.3 GHz, which is not sufficient to resolve all the high-Q features in the fiber transmission spectrum. For example, in the spectral region around 249 GHz in Fig. 3.7 we observe presence of the transmission peak, however in order to see the detailed structure of this resonant lineshape one has to use resolution which is at least ten time higher (0.03 GHz) as presented in Fig. 3.8(b). In the same Fig. we mark (dotted lines) the spectral positions of various Van Hove singularities as found from the band diagram of the corresponding infinite system (see Fig. 3.2). To remind the reader, Van Hove singularities are found at frequencies at which dispersion relations of the optical bands show local maxima or minima, and as a consequence, optical density of states at such singularities have particularly high values. From Fig. 3.7 we note that a great majority of the resonant peaks in the transmission spectrum correspond to Van Hove singularities in the optical density of states. However, as seen from Fig. 3.7, not all Van Hove singularities found in Fig. 3.2 manifest themselves as transmission peaks. This is because optical modes at such singularities are either incompatible by symmetry with the fundamental fiber mode (port mode), or because field overlap between the fiber and metamaterial modes is too small. Additionally, resonances at frequencies of Van Hove singularities will not be seen in the fiber transmission spectrum if the value of the coupling strength γ of a corresponding resonant state of a metamaterial is either lower than the spectral resolution used in numerical simulations, or if the coupling strength is smaller than the losses of a resonant state (Γ parameter in Eq. (3.5)). Note that although there are no material losses in our calculations, however, resonances may still possess radiation losses that could, in turn, result in disappearance of the resonant peaks from the fiber transmission spectrum.

Efficient coupling between the fiber mode (port mode) and metamaterial modes are observed in the spectral regions where dispersion relation of the fiber mode exhibits avoiding crossing with the dispersion relations of backward propagating slab modes. Backward propagating slab modes are the ones with dispersion relations that are folded back into the first Brillouin zone due to presence of a periodic SRR array (see, for example, a circled region at 0.29 THz in Fig. 3.2(b)). In this case, avoiding crossing between fiber and metamaterial

modes necessarily results in the creation of a Van Hove singularity, and the resultant hybrid modes in the vicinity of such a singularity show strong presence in the fiber core.

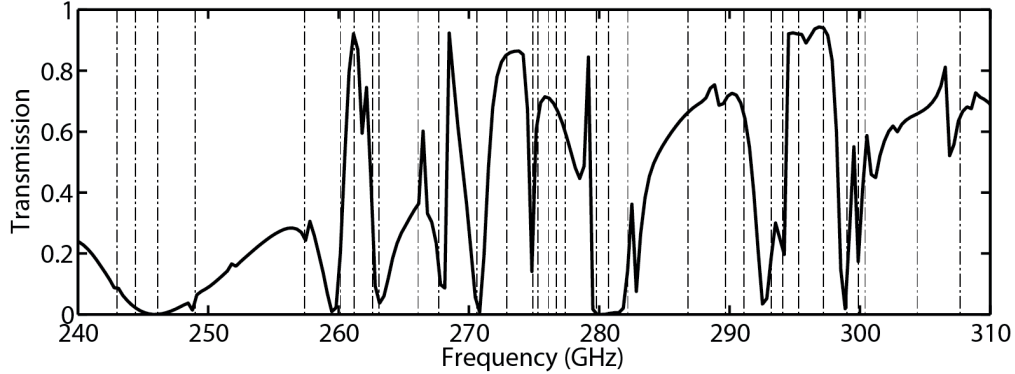


Figure 3.7 Fiber transmission spectrum for fiber-metamaterial system with $N_l = 10$ periods. Dotted vertical lines indicate spectral position of the Van Hove singularities as found from Fig. 3.2(b).

We now consider in more details formation of the resonant features in the fiber transmission spectrum when increasing the length of the fiber-metamaterial coupler. As an example, we consider changes in the line shape of a peak located at 249 GHz. In Fig. 3.8 we plot fiber transmission spectra for an increasing number of SSR periods. First, we note that the width of a resonance decreases rapidly when increasing the number of SRR periods from $N_l = 1$ to $N_l = 7$ (see Fig. 3.8(a)). Further increase in the number of SRR periods does not lead to a significant change in the peak width as seen in Fig. 3.8(b) where we present transmission spectra for $N_l = 8 - 11$. This behavior is expected as the peak width corresponds to the coupling strength between the fundamental fiber mode (port mode) and a particular metamaterial mode. This strength is, in turn, proportional to the overlap integral between the fields of the two modes. When increasing the number of SRR periods, the modal fields of a finite-size fiber-metamaterial coupler converge to those of an infinitely periodic system. Therefore one expects that the value of coupling strength, and, hence, the transmission peak bandwidth should also converge to a certain finite value.

Changes in the peak shapes can be studied quantitatively by fitting them with Fano line shapes and observing convergence of the Fano parameters when increasing the number of SRR periods. Particularly, using Fano line shapes similar to (3.11) we can extract the bandwidth and the asymmetry parameter for each of the peaks in Fig. 3.8. As the amplitudes of some transmission peaks in Fig. 3.8 are somewhat smaller than 1, we use the following generalized form of the Fano line shapes to fit the data :

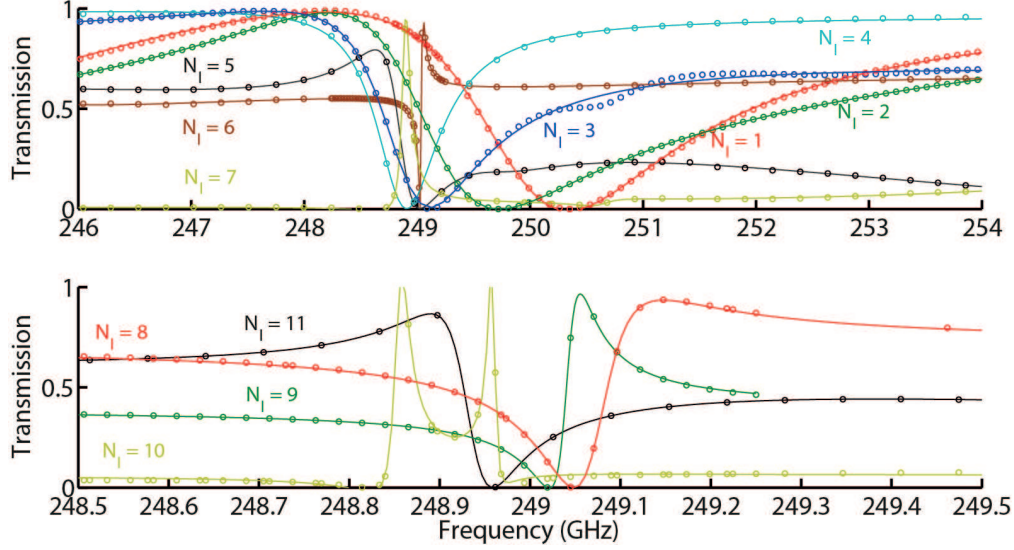


Figure 3.8 Fiber transmission spectra for various numbers of SRR periods in the fiber-metamaterial coupler in the vicinity of a peak at 249 GHz : (a) $N_l = 1 - 7$. (b) $N_l = 8 - 11$. Circles indicate numerical calculations, while solid lines are analytical fits using a single Fano line shape (3.14). (Exceptionally, data for $N_l = 10$ is fitted using two Fano resonances).

$$|t|^2(f) = \frac{a}{1 + q^2} \frac{(q\Gamma_\Phi + f - f_\Phi)^2}{\Gamma_\Phi^2 + (f - f_\Phi)^2} \quad (3.14)$$

where we restricted the fits to $\Gamma_\Phi > 0$, and $|q| < 1$. In Fig. 3.9 we show the results of the fitting and observe general convergence of the peak parameters when increasing the number of SRR periods. We note that one exception to our fitting procedure is the case of $N_l = 10$. For this number of SRR periods, a second peak appears accidentally in the vicinity of our main peak. In this case, the line shape (3.14) can no longer be used to perform the fit, therefore this point is omitted from Fig. 3.8. Unfortunately, calculations with the larger number of periods becomes impossible because of the virtual memory limitation (128G) of our machine.

3.10 Resonance engineering using band diagram calculations

It was shown in sections 3.7 and 3.8 that position and bandwidth of resonances in the fiber transmission spectrum can be tuned by varying separation between fiber and metamaterial. Frequency tuning using mechanical means, such as changing the fiber-metamaterial separation, is especially interesting for THz point-based devices due to ease of its practical implementation. As we have mentioned earlier, spectral position of the resonances in the fiber transmission spectrum can be predicted by identifying the frequencies of Van Hove singularities in the fiber-metamaterial band diagram. This method is considerably faster and

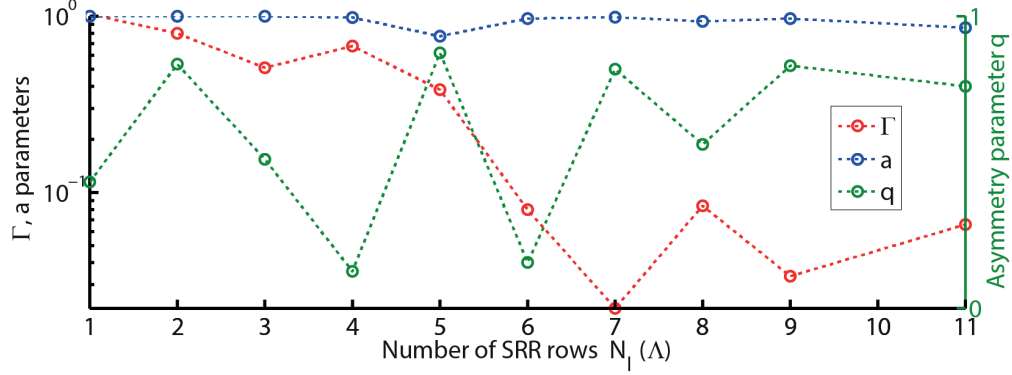


Figure 3.9 Peak amplitude a (blue), peak bandwidth Γ_Φ (red), and peak asymmetry q (green) obtained from fitting the resonant line shape near 249 GHz (see Fig. 3.8) with Fano line shape.

less computationally intensive than a full transmission simulation. To ensure that Van Hove singularities found in the band diagram indeed manifest themselves in the fiber transmission spectrum, it is necessary to label all the optical states in the band diagram according to the relative amount of the electromagnetic fields in the fiber core. Then, a Van Hove singularity that is formed by avoiding crossing of modes with at least one of them having a significant presence in the fiber core will appear in the fiber transmission spectrum.

By varying the fiber-metamaterial separation and recomputing the band diagram for an infinite fiber-metamaterial system one can, therefore, tune position of the resonances in the fiber transmission spectrum, while avoiding a full transmission calculations.

3.11 Conclusion

In this work we studied the use of subwavelength terahertz fibers as light delivery and interrogation platform for probing metamaterials. Particularly, we studied transmission through a subwavelength fiber that is placed in parallel to a frequency selective surface. Thus defined coupler can operate both in the weak and strong coupling regimes depending on the field overlap between the fiber and metamaterial modes. This coupling is controlled conveniently by the fiber-metamaterial separation. Different polarization states can be realized in this arrangement with electric field either parallel or perpendicular to the metamaterial surface depending on polarization of the fiber mode.

Both the band diagram technique and the port-based scattering matrix technique were used to explain the nature of various resonances in the fiber transmission spectrum. We have concluded that spectral positions of most of the transmission peaks in the transmission

simulation can be related to the positions of Van Hove singularities in the band diagram of a corresponding infinite periodic system. In the limit of weak coupling between the fiber and metamaterials modes, Van Hove singularities are found in the region of avoiding crossing between dispersion relation of a fiber mode and dispersion relation of a particular slab mode that was folded back into the first Brillouin zone due to its interaction with a periodic SRR array. Spectral shapes of most of the features in the fiber transmission spectrum were found to be of either Fano-type or EIT-type. Finally, we have demonstrated that center frequencies and bandwidths of these resonances and, as a consequence, spectral shapes of the corresponding transmission features can be efficiently tuned by varying the fiber-metamaterial separation.

We believe that this is the first time when interaction between THz subwavelength fiber and frequency selective surface was studied in details. Our main motivation behind this study is development of a convenient fiber-based platform for designing integrated THz devices based on fiber-metamaterial couplers for applications in sensing and signal processing. In the geometry presented in this paper (single fiber suspended over metamaterial), the most evident application in signal processing would be spectral filtering and pulse shaping. Other metamaterial geometries such as chiral resonators exhibiting optical activity [79] can be used to transform polarization in the fiber by allowing mode mixing of normally incompatible symmetries, such as the $\mathbf{x}$ and $\mathbf{z}$ polarized HE_{11} fiber modes. In combination with actively tunable metamaterials, this can be used to realize THz beam polarization modulation. Addition of a second fiber underneath the metamaterial could produce a channel add-drop filter, provided that the metamaterial is carefully chosen. In general, tunable metamaterials (which have been proposed by many for THz wave modulation, see [65, 80]) that are interrogated with fibers, may be used to realize compact integrated fiber pigtailed modulators, which can be an elegant solution for THz communications.

3.12 Acknowledgments

Funding for this project came from the NSERC strategic grant 430420 with the in-kind support from Honeywell Asca Inc., Vancouver Operations, and TeTechS Inc. Also, we would like to acknowledge Prof. M. Koch and his student N. Born for some fruitful discussions that we had with them at the beginning of the project in 2011. At that time Prof. M. Koch has contributed some experimental samples that we plan to use in our future experimental work.

CHAPITRE 4

Article 2. Integrated terahertz multiparameter sensors using fiber/frequency selective surface couplers

Ce chapitre est la copie de l'article invité qui a été soumis à *Journal of Optics*. Il étudie la construction d'un senseur à partir du dispositif du chapitre précédant.

4.1 Authors

Martin Girard, Maksim Skorobogatiy

École Polytechnique de Montréal, Department of Engineering Physics

C.P. 6079, Centre-Ville Montréal, Qc, H3C 3A7, Canada

4.2 Abstract

We propose using THz frequency selective surfaces interrogated with THz subwavelength optical fibers as sensors for monitoring of the optical properties of thick films that are brought in contact with such surfaces. Changes in the test film thickness and absorption losses can be measured simultaneously by interpreting variations in the spectral resonant features in the fiber transmission and reflection spectra. Particularly, changes in the film thickness induce strong shifts in the fiber transmission peaks, while changes in the film absorption induce notable amplitude variations in the fiber reflection peaks. When applied to the problem of monitoring of thickness and humidity content in the paper sheets, the proposed system shows sensitivity of $1.5 \text{ GHz} / 10 \mu\text{m}$ to changes in the paper thickness, and sensitivity of $0.6 / (\%$ of water by volume) to changes in the paper humidity. We estimate the detection limit of our device to be $10 \mu\text{m}$ for the paper thickness variation and 0.02% (of water by volume) for the paper humidity variation. Proposed sensor is implemented in the spirit of integrated optics, where a point device based on the frequency selective surface is interrogated with a THz fiber that is used for remote delivery of THz radiation.

4.3 Introduction

Recently, we have reported a theoretical study of transmission spectra of a subwavelength THz fiber that was evanescently coupled to a metasurface made of split ring resonators (SRR) deposited on a fused silica substrate [81]. Our original goal was to replace a traditional

free-space THz time domain spectroscopy (THz-TDS) interrogation technique used to probe metasurfaces, with a fiber-based system, which would enable remote delivery of optical power, as well as interrogation of passive THz devices.

From our calculations, we find that transmission spectrum of a fiber that is evanescently coupled to a frequency selective surface (FSS) differs significantly from the transmission spectrum of a FSS measured perpendicular to its surface. Particularly, a typical transmission spectrum through a SRR-patterned FSS, shows a few relatively broad spectral features. In contrast, transmission spectrum of a fiber coupled evanescently to FSS, shows a large number of sharp (~ 1 GHz) Fano resonances. To understand the nature of these peaks we note that a fiber coupled to a periodically patterned FSS represents by itself a periodic system. The corresponding modal structure of a fiber / FSS system can thus be analyzed using folded band diagram of the optical states. Strong coupling between the THz fiber modes and those of a FSS, results in a pronounced anti-crossing behavior that also shows many flat regions in the dispersion relations of various fiber / FSS hybrid modes. As it is well known from the theory of periodic optical systems, such flat regions in the modal dispersion relations are characterized by significantly increased density of optical states and are known as Van Hove singularities. Finally, in our prior work [81], we show that spectral position of the Fano resonances in the fiber transmission spectrum correspond exactly to spectral position of the Van Hove singularities in the corresponding band diagram of an infinite fiber / FSS system.

As it is the case with any sharp resonance, one can use changes in its spectral position and shape in order to monitor the properties of a measurand that is somehow coupled to the corresponding optical resonant state. For example, in [82], authors use changes in the spectral position of Fano resonances as a sensing mechanism to identify recognition proteins monolayers adsorbed on a functionalized metasurface, at infrared frequencies.

In [81], we had shown strong sensitivity of the Fano resonances in the fiber transmission spectrum to the fiber-metamaterial separation. Therefore, it is natural to question whether we can use fiber / FSS couplers with their sharp resonant features as a sensor. Currently, fabrication of the plastic THz fibers and SRR-patterned substrates is readily achieved using a variety of inexpensive fabrication techniques. In fact, anyone who has access to either Time Domain Spectroscopy or Frequency Domain THz systems, or even a single frequency THz source, can benefit from the fiber / FSS sensors described in this work.

Our work is motivated by the practical need for multiparameter sensors that are capable of monitoring various physical properties of thick ($>10 \mu\text{m}$) optically opaque layers (such as paper), where the traditional optical interference or spectroscopic techniques are unusable [83]. In particular, simultaneous characterization of paper thickness, density and humidity is an important industrial problem in paper manufacturing. Currently, one resorts to using

several distinct sensors to do such a characterization, which require substantial integration engineering effort at the production line. Multiple sensors are typically integrated into scanning heads, which are then placed at various locations of the production line [84].

The paper thickness is usually measured by an electronic caliper, where two fingers touch the paper, and the distance between the fingers is determined by the electromagnetic measurement with a precision of $0.5 - 1 \mu\text{m}$. This method, however, has significant disadvantages. As the paper sheet moves at high speeds (as high as 10m/s), the fingers can tear the paper. Moreover, the fingers can polish the paper, producing a glossy stripe along the length, while also suffering wear from the mechanical contact with the paper.

In the case of water content, the measurement is typically performed by interpreting transmission through paper of several distinct infrared wavelengths (usually 3 or 4) that are chosen to coincide with paper and water absorption lines. This is a non-contact characterization technique, which has a typical resolution 0.25% of water by volume.

As the paper industry desires new sensors for quality control, such as printability, fiber orientation, porosity, etc., the density of sensors in the production line will invariably increase. Multiplication of scanners is something that industry wants to avoid, both due to complexity of integration and maintenance, increased rates of failures, as well as due to added costs.

Recently, in [85] the authors reported using THz time domain spectroscopy (THz-TDS) to measure thickness and absorption of the paper films. This method profits from the relative transparency of paper to THz waves, and from the ability of THz-TDS setup to measure simultaneously the amplitude and phase of the electric field transmitted through the paper film under test. They experimentally measured the thickness with a $0.5 \mu\text{m}$ precision, while the moisture content measure had a precision of 0.25% (per weight), with a confidence level of 68% . The sensor system presented in [85] is essentially a classic THz-TDS setup that uses bulky free space optics in a highly precise arrangement that can be challenging to maintain and service when installed on a real production line. The system can be prone to signal variations due to ambient humidity variations, unless the THz optics is sealed in the compartment with controllable atmosphere. A similar characterization technique was recently used in [86] with a goal of characterizing water content in plants. In that work, many of the engineering challenges mentioned above were identified and successfully addressed, and the authors managed to build a functional hand-held system. Finally, the use of terahertz time-of-flight measurement have been suggested in [87], where the authors demonstrated simultaneous measurement of the film refractive index and thickness with good precision, however, no absorption measurements were reported.

In this work we propose the use of fiber-metasurface coupler to measure simultaneously thickness and water content of a paper layer. Changes in the paper thickness are monitored

by registering spectral shifts of the peaks in the fiber transmission spectrum, while changes in the paper humidity are interpreted from variations in the peak amplitudes in the fiber reflection spectrum.

4.4 Device Geometry

The proposed device consists of a subwavelength fiber of radius $R = 200 \mu\text{m}$ suspended over a FSS constructed by patterning split-ring resonators (SRR) on a $320 \mu\text{m}$ dielectric slab. The geometry is illustrated in Fig. 4.1, with geometrical parameters $h = 25 \mu\text{m}$, $\Lambda = 400 \mu\text{m}$, $r = 90 \mu\text{m}$, $w = 15 \mu\text{m}$ and $\theta = 30^\circ$. The fiber is made of low-loss plastic such as Polyethylene ($n_{\text{fiber}} = 1.55$), while the slab is made of fused silica ($n_{\text{substrate}} = 1.97$). The SRRs are assumed to be made of perfect electric conductors. The paper film under test is placed in direct contact with the FSS substrate.

Clausius-Mossotti model [88] along with liquid water permittivity measurements [89], as well as a double-Debye model [90] with Bruggeman effective medium [85] have been used to model dielectric constant of paper in the presence of humidity. In our simulations, we used a dispersionless permittivity for simplicity, based on results from [88, 89].

A Bloch-Floquet condition is used for band diagram calculations to find the optical states in the infinitely long fiber/FSS structure. For finite structures, the port boundary condition is used with S-parameter calculations in order to compute fiber transmission and reflection spectra. COMSOL commercial finite element software is used in all calculations. For port boundary conditions, we assume a single mode both at the input waveguide and at the output waveguide in the form of the fundamental HE_{11} fiber mode, linearly polarized along the $\mathbf{z}$ axis. A periodic boundary condition is imposed in the $\mathbf{x}$ direction to simulate an infinite metamaterial. A few millimeters of air are present over and under the system in the $\mathbf{z}$ direction and the computational cell is terminated with a PML.

4.5 Fiber transmission and reflection spectra

In order to interpret the fiber transmission $t(f)$ and reflection $r(f)$ spectra, we use the scattering theory detailed in [70]. The scattering theory considers interaction of N_r localized resonances with a single guided mode. In our case, the guided mode is the fundamental HE_{11} fiber mode and the resonances are the FSS substrate modes coupled to the fiber mode via split-ring resonators. For a system with lossy resonator states, we use a transfer matrix method [77], which requires solving the equation :

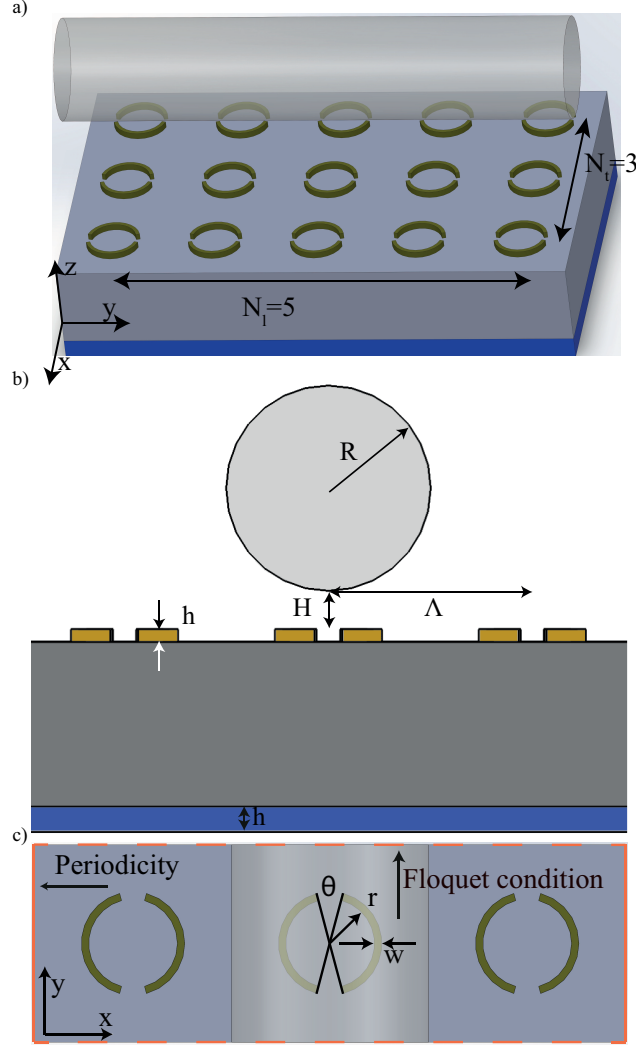


Figure 4.1 a) 3D rendering of a subwavelength THz fiber interrogating a frequency selective surface featuring 6 periods in the longitudinal direction and 3 periods in the transversal direction. Test film is placed in contact with the flat part of a substrate. b) Side view, c) top view of the unit cell that corresponds to a) and that we use in the band diagram calculations.

$$\begin{pmatrix} t(f) \\ 0 \end{pmatrix} = \bar{M}(f) \begin{pmatrix} 1 \\ r(f) \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Where the transfer matrix $\bar{M}$ is defined by :

$$\bar{M} = \prod_{j=1}^{N_r} \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} & -\frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} \\ \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} & 1 + \frac{i\gamma_j}{f-f_j+i\Gamma_j} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Where f_j , γ_j and Γ_j are the resonant frequency, coupling strength and losses that charac-

terize the j th resonance. Particularly, resonant frequency corresponds to the phase matching point between fiber and FSS substrate modes, coupling parameter is characteristic of the spectral width of the resonance, while the loss parameter also includes additional absorption losses introduced by the lossy paper film, as well as radiation losses if the mode in question is leaky. In the rest of the paper we do not take into account absorption losses of the fiber material and FSS substrate, which is a valid approximation at lower frequencies (below 0.5 THz), where material losses of many dry dielectrics are small.

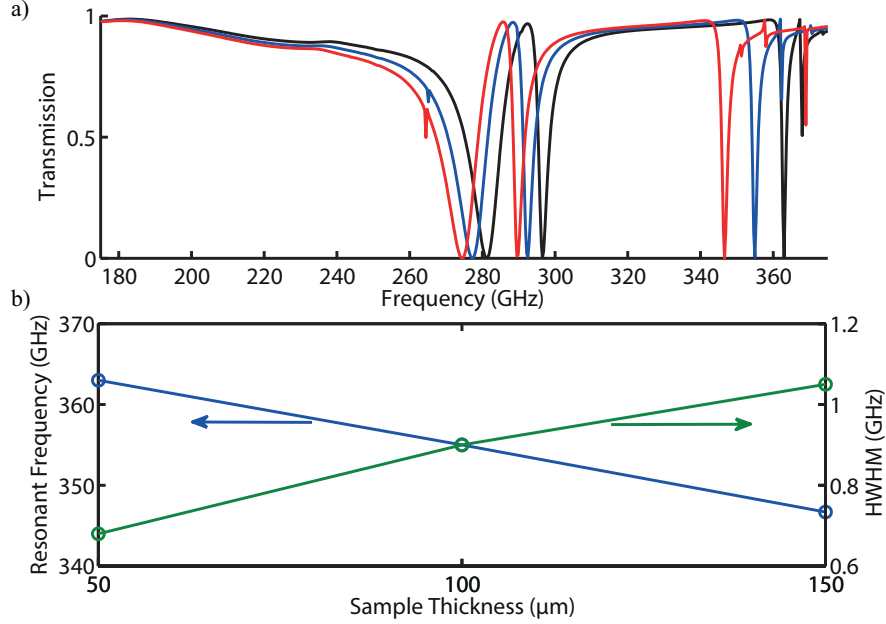


Figure 4.2 a) Transmission through a subwavelength fiber coupled to a single cell of a FSS for various values of the paper thickness $t = 50 \mu\text{m}$ (black), $100 \mu\text{m}$ (blue), $150 \mu\text{m}$ (red). b) For the peak near 350 GHz, dependence of the peak parameters on the paper thickness.

As we have mentioned earlier, variations in the paper thickness h changes geometry and modal properties of the FSS cladding. Thus, we expect strong changes in the position of the fiber transmission resonances. In Fig. 4.1 we present transmission spectra through a fiber suspended over a single period of a FSS ($N_l = 1$, $N_t = 3$, in Fig. 4.1) for various values of paper thicknesses $h = [50 \mu\text{m}, 100 \mu\text{m}, 150 \mu\text{m}]$. In this simulation we assume lossless paper $\Gamma = 0$, while the real part of the paper permittivity is constant and equal to 2.25. As paper thickness is varied, clear spectral shifts are observed in the position of the transmission peaks. Peak parameters can be extracted from the transmission spectra by fitting them with lineforms defined by 4.1 and 4.2. The largest frequency shift is produced by the peak near 350 GHz. We note that the peak spectral shift and the peak width (coupling parameter) depends linearly on paper thickness (see Fig 4.2) in the studied parameter range. The spectral sensitivity, which

is defined as a ratio of the frequency shift to the change in the layer thickness is calculated to be as high as $1.6 \text{ GHz} / 10 \text{ } \mu\text{m}$.

We now study changes in the fiber reflection spectrum when non-zero paper absorption loss is considered. As follows from the lineshape 4.2, in the absence of losses, directly at the resonance, the reflection is perfect. When losses are introduced, the reflection coefficient at resonance decreases with increased losses Γ as :

$$R = |r|^2 = \frac{\gamma^2}{(\gamma + \Gamma)^2} \quad (4.3)$$

This lineshape is only valid for a single resonance, and it should be modified when two or more resonances are found in the direct vicinity of this resonance.

Losses Γ in 4.3 can be varied by changing the imaginary part ϵ'' of the paper permittivity. In Fig 4.3(a) we show reflection spectra for $\epsilon''/\epsilon_0 = [0.01, 0.03, 0.05]$. These values for the ϵ'' of the humid paper correspond to the water content (by volume) of 0.85% to 4.1%, as calculated by assuming the Clausius-Mossotti model for the humid paper, and $\epsilon''_w = 4.75$ for the bulk water [89].

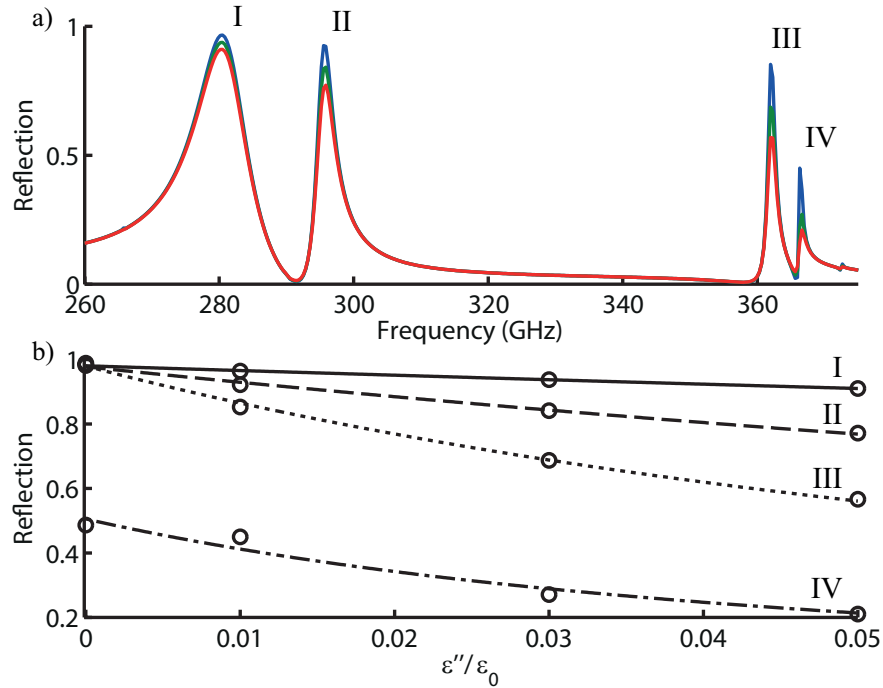


Figure 4.3 a) Fiber reflection spectra for different values of the water content (by volume) $w = 0.85\%$, $\epsilon'' = 0.01$ (blue); $w = 2.5\%$, $\epsilon'' = 0.03$ (green); $w = 4.1\%$, $\epsilon'' = 0.05$ (red). b) Value of the maximal reflection for four different resonances, I (solid), II (dashed), III (dotted), IV (dash-dotted), as a function of ϵ'' (paper thickness is fixed and equals to $50 \text{ } \mu\text{m}$).

In Fig. 4.3(a) we present dependence of the reflection peak shapes (labeled in Fig 4.3(a) as I, II, III, IV) on paper losses. For each peak, lineshape 4.3 is used to fit the maximal value of the reflection as a function of the paper loss, where we assume that $\Gamma = C_{\Gamma}\epsilon''$, where C_{Γ} is a fitting constant. An excellent agreement is found between the numerical results (circles in Fig. 4.3(b)) and analytical fitting with 4.3 (continuous curves in Fig. 4.3(b)). Interestingly, when increasing paper losses, maximal value of the reflection coefficient falls much faster for narrower peaks (that are characterized by smaller values of the coupling parameter γ). This is well in accordance with the form of lineshape 4.3. Defining sensitivity to changes in the water content as a derivative of the value of the reflection coefficient with respect to the water concentration (by volume), we conclude that the sensitivity as high as 0.08 / (water % by volume) can be achieved at low humidity.

4.6 Band diagram versus S-parameter simulations

So far, we have presented transmission and reflection spectra of the subwavelength fiber coupled to a single cell of a FSS. In Fig. 4.4 we present transmission and reflection spectra for the subwavelength fiber coupled to a 10-period long section of a FSS. Compared to the case of a FSS with a single period, the spectra for a longer system features a much larger number of sharp resonances, typically with Fano lineshapes (for a detailed discussion of this phenomenon see our prior work [81]). This abundance of resonant peaks presents us with an opportunity of choosing the peak with optimal parameters for the multiparameter detection modality. First of all, as we have mentioned earlier, using narrow resonances in reflection spectrum is advantageous for sensing changes in the paper losses. At the same time, one cannot use peaks with high radiative losses to determine water content (see for example spectral dips in the vicinity of 300 GHz in Fig. 4.4) as the change in the reflection coefficient would be too small. Moreover, the peak width should be larger, while comparable, to the spectral resolution of a THz measurement setup. As an example, in [91] we have demonstrated experimentally using resonances of a THz fiber Bragg grating as narrow as 4 GHz, while using THz-TDS setup with 1.5 GHz resolution (600 ps –long scans).

In what follows, we therefore focus on the peaks that feature low radiative losses and spectral widths in the range of 1 GHz. Seven particular resonances (labeled as I-VII) have been chosen in Fig. 4.4 for further studies.

To predict changes in the spectral position of resonant peaks caused by variations in the paper thickness, a direct approach would be to repeat the S-parameter calculations for each thickness value. This, however, is not a viable proposition if long sections of FSS are used. For example, in order to compute Fig. 4.4, it takes 80 GB of memory, and 5 days of

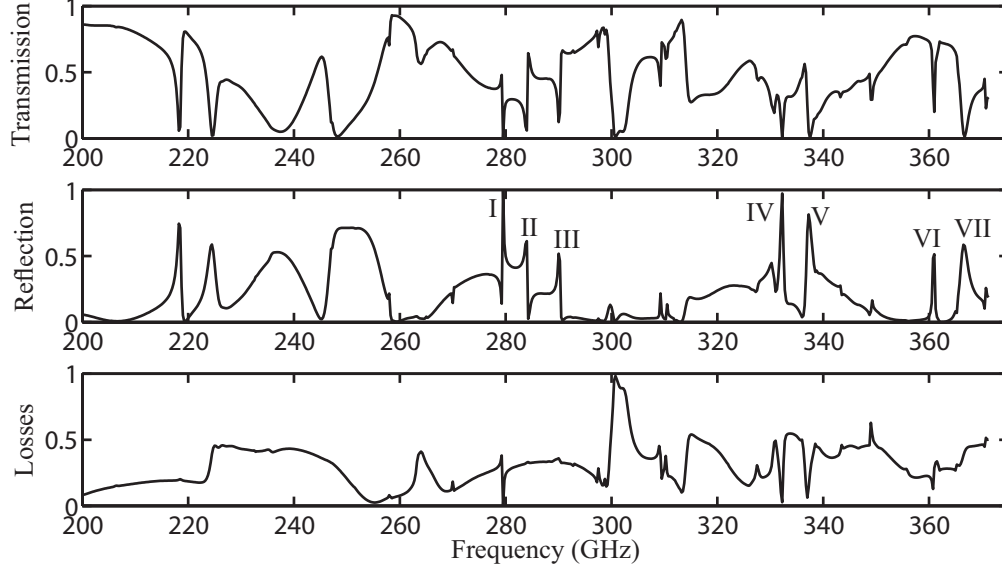


Figure 4.4 Interrogation of a longer section of FSS (10 periods) with a subwavelength fiber. a) Transmission spectrum, b) reflection spectrum, and c) losses ($1-R-T$).

time. Therefore, a more robust method is required. One such method uses fast band diagram calculations (also known as the $\omega(k)$ method) to predict positions of the resonant peaks in the fiber transmission spectra. As detailed in [81], resonances seen in Fig. 4.4 correspond to Van Hove singularities in the band diagram of the optical states of an infinite fiber / FSS system. In Fig. 4.5(b) we demonstrate the band diagram method on the example of resonance VI. In this figure band diagrams are presented for various thicknesses of the paper layers and the positions of Van Hove singularities that correspond to resonance VI are highlighted in dashed circles. Spectral positions of the resonances can then be tracked simply by plotting a series of the band diagrams corresponding to the paper thicknesses of interest. This method is used to calculate solid curves in Fig. 4.5(b). One can also confirm the validity of this approach by performing much longer S-parameter calculations. Results of these simulations for resonances VI and VII are presented as dashed lines. An excellent correspondence between the band diagram approach and an S-parameter approach is observed. Finally, using data from Fig. 4.5(b), we can calculate spectral sensitivity of the peak position to changes in the paper thickness for various resonances to be 0.8 GHz / 10 μm , 1 GHz / 10 μm , 1.1 GHz / 10 μm , 1.1 GHz / 10 μm , 0.85 GHz / 10 μm , 1.5 GHz / 10 μm and 1.6 GHz / 10 μm for resonances I-VII, respectively. It should be noted that for most resonances, shift in their spectral position is mostly linear with changes in the paper thickness (in the 0 – 85 μm paper thickness range). Notable exceptions are resonances III, IV and V. The reason for this is that the bands on which the Van Hove singularities are located move in frequency at a different

rate than other adjacent bands. Due to interaction between these bands, they repulse each other in frequency and the displacement becomes non-linear.

Finally, we note that band diagram calculations (of the $\omega(k)$ type) cannot be used directly to compute the resonance loss parameter Γ . Therefore, changes in the reflection coefficient have to be calculated using an S-parameter method. In Fig. 4.6(a) we present changes in the fiber reflection spectrum as a function of the paper loss (water content). As expected, higher paper losses result in smaller values of the reflection coefficient at resonance. To quantify this observation, in Fig. 4.6(b) we present maximal values of the reflection coefficient at various resonances (identified as I – VII in Fig. 4) as a function of the paper loss parameter $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.01, 0.03, 0.05$. These values of the imaginary part of the paper permittivity correspond to the 0.85%, 2.5% and 4.1% of water by volume in the paper. Individual data points (circles in Fig. 4.6(b)) are then fitted with lineform 4.3 (solid curves in Fig. 4.6(b)). Excellent fit is observed with a simple lineshape (3) for all the resonances except I and II. For these two resonances it is necessary to add a constant baseline to the lineshape 4.3. This is because these two resonances are too closely spaced with respect to each other, therefore, a simple lineshape 4.3, which describes a single standing resonance, is no longer adequate. From the data in Fig. 4.6(b) we calculate that sensitivities as high as $52 / (\epsilon''/\epsilon_0)$, or $0.60 / (\% \text{ water by water})$ can be achieved at low humidity levels (peak I). If we assume that a change of 1% of the reflectivity is measurable, the limit of detection for water content is $\sim 0.02\%$. This value can potentially be further decreased by using a thinner substrate, but one has to consider experimental problems related to very thin substrates and implementation of such a sensor in industry. In Fig 4.6(c) we show the change in the resonant field for resonance I between $\epsilon'' = 0$ and $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$, with the same injected field power. A clear change of behavior in stored power is seen between the two figures, with the losses inducing attenuation with propagation distance.

While more resonant peaks could be found at higher frequencies, material absorption of the FSS substrate and fiber material also increases with frequency. For example, absorption for fused silica changes from $\sim 0.25\text{cm}^{-1}$ at 0.5 THz to $\sim 1\text{cm}^{-1}$ at 0.75 THz to $\sim 2\text{cm}^{-1}$ at 1 THz [9], while absorption loss of polyethylene varies from $\sim 0.1\text{cm}^{-1}$ at 0.5 THz to $\sim 0.3\text{cm}^{-1}$ at 1 THz [92]. As follows from the general considerations of the scattering theory 4.2, increase in the material losses will significantly reduce sensitivity of the resonances to changes in paper loss when resonance loss becomes comparable to the coupling strength parameter $\Gamma \sim \gamma$. Therefore, at higher frequencies, it is important to take into consideration material losses of the fiber / FSS system to produce a realistic analysis of sensor performance.

Another potential degrading factor is the uniformity of the fiber-FSS cell. While the system may not be highly sensitive to fiber-metamaterial separation H , due to characteristic

distances in the hundreds of microns [81], other potential non-uniformities may plague the system. Imperfections, such as surface roughness of the fiber, substrate and paper layers can induce additional losses, lowering the sensitivity of the sensor. In the case where high losses (substrate absorption, scattering, etc.) are present, using a resonance with a better sensitivity at high water content on Fig. 4.6, such as resonance IV may prove a better choice. In that particular case, the maximum achievable LOD is of 0.14% of water content.

4.7 Conclusions

In conclusion, we have demonstrated a multiparameter sensor based on the frequency selective surface interrogated with a THz optical fiber that is capable of simultaneous measurement of both the paper thickness and water content. The transduction mechanism based on analysis of the fiber transmission and reflection spectra is analyzed using band diagram and S-parameter calculations. For the variations in the water content (paper humidity), sensitivities as high as 0.6 / (% of water by volume) are predicted. The corresponding detection limit of 0.02% of water variation by volume is estimated by assuming that reliable detection of 1% change in the value of the reflection coefficient is possible. For the variations in paper thickness, sensitivities as high as 1.5 GHz / 10 μm are predicted. The corresponding detection limit of 10 μm in paper thickness variation is estimated by assuming that spectral resolution of a TDS-THz setup is 1.5 GHz.

These values are superior to those previously reported for other types of metamaterial-based sensors of thickness [49, 93] for thick samples. These sensors used a resonance shift to measure thickness, with high sensitivity (up to 400 GHz / μm) up to ~ 20 μm thickness and nearly zero for thicker samples ($\sim 1 - 2$ GHz shift in the 20 $\mu\text{m} - 100$ μm range). Moreover, our sensor exhibits a virtually linear response over a wide range of thicknesses, while sensors presented in [49, 93] show highly nonlinear exponential behavior. Although our sensor shows somewhat inferior sensitivity when compared to a direct THz-TDS-based thickness measurements detailed in [85], however, at the same time, it shows significantly higher sensitivities for the water content measurements. Furthermore, our approach does not require a coherent detection strategy, therefore, much cheaper incoherent narrow-band sources and detector can be used. Finally, the proposed sensor is implemented in the spirit of integrated optics, where a point device based on the FSS is interrogated with a THz fiber that is used for remote delivery of THz radiation. We believe that this paradigm is advantageous for building modular, highly sensitive, while practical THz sensors.

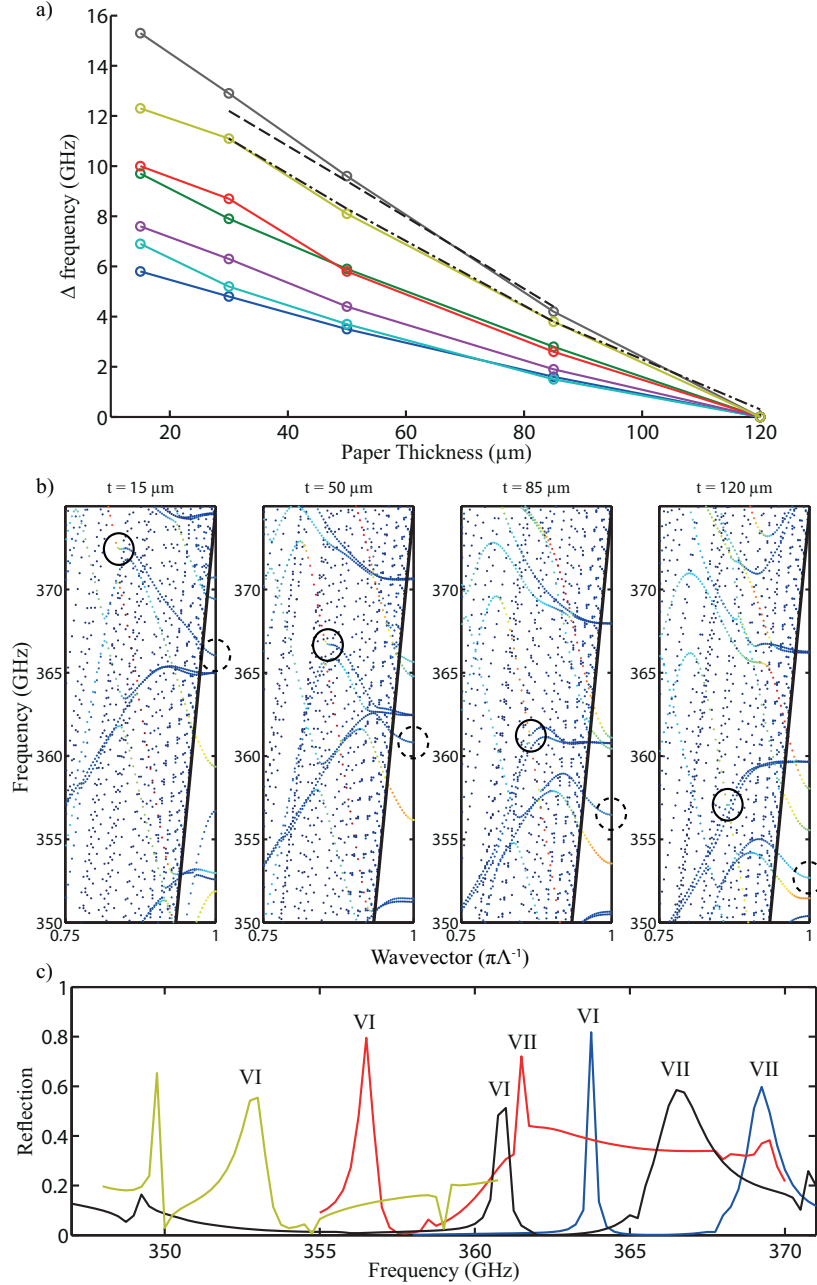


Figure 4.5 Spectral change in the peak positions for different values of paper thickness. Presented data is for resonances I (blue), II (green), III (red), IV (cyan), V (purple), VI (yellow), VII (black). In solid curves – results of the band diagram calculations, in dashed curves – results of the S-parameter calculation VI (dot-dashed) and VII (dashed). b) Band diagrams of the optical states for an infinite fiber / FSS system for various values of paper thicknesses of 15 μm , 50 μm , 85 μm and 120 μm (resonance VI - dashed circles). c) S-parameter calculations for resonances VI and VII for paper thicknesses of 30 μm (blue), 50 μm (black), 85 μm (red) and 120 μm (yellow) used to confirm results of a) and b). A clear change of peak shape is seen for resonance VII between thicknesses of 50 μm and 85 μm . Resolution step for calculations is 0.25 GHz in a) and c)

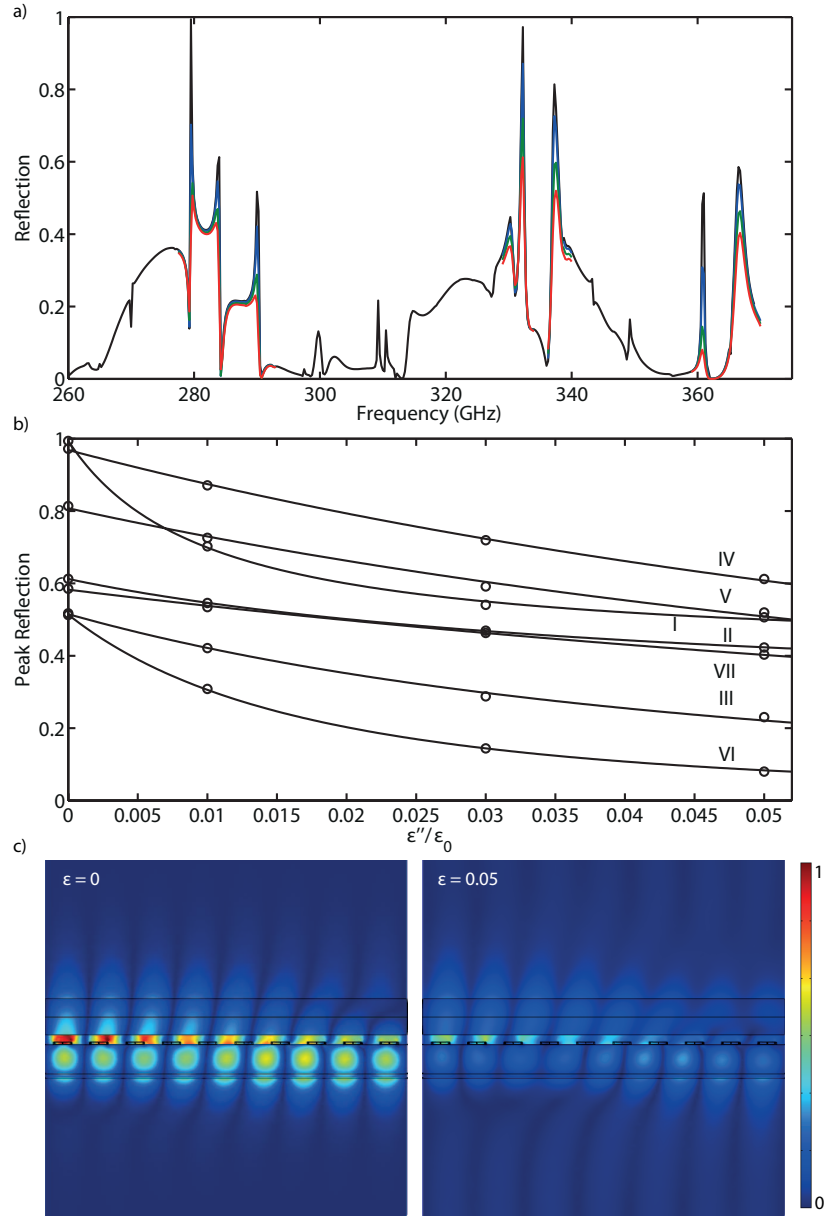


Figure 4.6 a) Fiber reflection spectra calculated using S-parameter approach for different values of water content $w = 0$ (black), $w = 0.85\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.01$ (blue); $w = 2.5\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.03$ (green); $w = 4.1\%$, $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$ (red) and a fixed paper thickness of $50 \mu\text{m}$. Reduction in the maximal values of the reflection coefficient at resonances is clearly visible when the paper loss increases. b) Maximal value of the reflection coefficient for peaks I – VII. Circles – S-parameter calculations, solid curves - fitted lineshape 4.3. c) field distribution for resonance I at $\epsilon'' = 0$ and $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$.

CHAPITRE 5

ASPECTS MÉTHODOLOGIQUES ET DISCUSSION GÉNÉRALE

Ce chapitre présente une discussion des points méthodologiques qui n'ont pas été mentionnés explicitement dans les articles. Les deux articles inclus dans ce mémoire répondent directement à la problématique soulevée dans 1. Ils répondent directement aux objectifs de recherche puisqu'ils abordent, dans un premier temps, le comportement des métasurfaces excitées par un guide d'onde et, dans un second temps, montrent une fonctionnalisation du dispositif.

5.1 Convergence des simulations

Une des études importantes ne pouvant être faite facilement avec le modèle utilisé est l'analyse de convergence du système en fonction du nombre d'éléments pour le résultat final. Généralement, pour la FEM, on considère que les éléments doivent avoir une taille maximale de $\lambda/3$ pour obtenir un résultat satisfaisant, ce qui est la taille utilisée pour les calculs de ~ 10 périodes, puisqu'on arrive à la limite des capacités de l'ordinateur de calcul. Par contre, on peut étudier la convergence pour un système très simple, c'est-à-dire, la transmission au travers d'une seule période de 3 boucles de large. Pour illustrer cette convergence, on trace sur la figure 5.1 le calcul de $|S_{21}|^2$ effectué par COMSOL pour différents nombres d'éléments. On note que le raffinement se fait en augmentant la densité d'éléments dans la région d'intérêt, soit le substrat, la fibre et les SRR.

À partir de ces courbes, on peut utiliser une régression dans la forme de (2.33) afin d'étudier la convergence des paramètres de résonances. La convergence théorique des champs électromagnétiques devrait avoir une tendance en $\text{Err} \sim O(N^{-p})$ où N est le nombre d'éléments dans le système et $p = 3$, provenant de la théorie de la FEM pour des éléments quadratiques. On note cependant ici que l'augmentation du nombre d'éléments dans le système n'est pas uniforme et que l'on regarde ici une fonction des champs électromagnétiques. Ici, la position de la résonance elle-même dans le système converge en $O(N^{-3})$ et cette contribution est mise au carré dans $|S_{21}|^2$ et porte donc la convergence à $O(N^{-6})$. Le terme considéré ici est une intégrale (au sens faible) sur la surface du domaine de simulation, qui converge en N_s^{-3} . Cependant la relation entre N_s et N n'est pas directe et dépend du générateur de grille. Un raffinement direct des polygones dans la simulation mène à une multiplication par 8 de N et

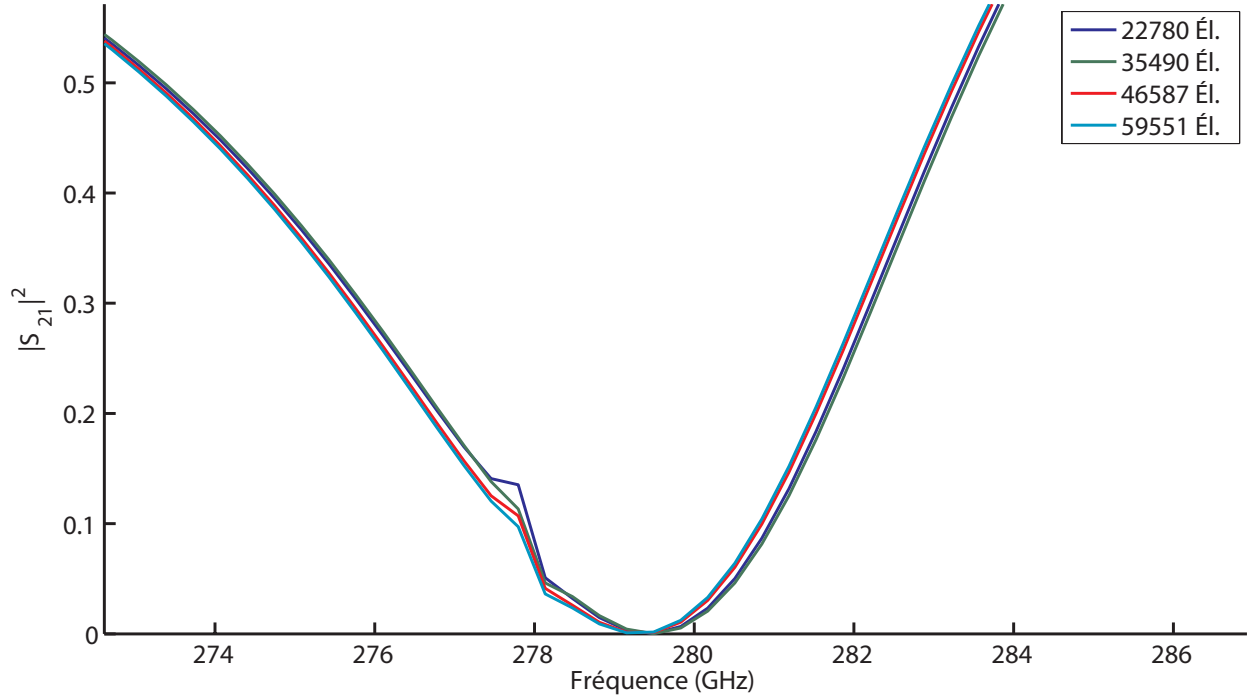


Figure 5.1 Calcul de $|S_{21}|^2$ effectué par COMSOL pour différents nombre d'éléments. Le système est celui du chapitre 4, avec un substrat de $320 \mu\text{m}$ d'épais et $50 \mu\text{m}$ de papier sec ($\epsilon'' = 0$). La résolution en fréquence sur ce graphique est de $\Delta f \approx 0.34 \text{ GHz}$, ce qui empêche la discrimination d'une résonance près de 278 GHz .

par 4 de N_s , par exemple. La convergence des paramètres extraits de 5.1 devrait donc suivre $6 \leq p \leq 12$ et $p = 6$ lorsque $N \rightarrow \infty$ (le nombre d'éléments de surface comparé au volume devient infiniment faible). L'évaluation des paramètres q et Γ dépend des résonances avoisinantes, qui ne sont pas résolues dans la plage de fréquences évaluées sur la figure 5.1. Pour tracer la courbe de convergence de ω_r , on utilise la courbe ayant N la plus élevée comme étant le meilleur estimateur, c'est-à-dire que l'erreur est déterminée comme $\text{Err} \sim |u - u_{\max(N)}|$, où u est un paramètre obtenu par régression de 5.1. La convergence des paramètres f_r sont présentées sur la figure 5.2. Le taux de convergence obtenu est inférieur au taux théorique, avec une valeur de $p = 4.45$. Les simulations dans les articles sont effectués autour de 30000 éléments ($10^{4.47}$) pour un domaine de cette taille, ce qui montre que les erreurs peuvent être relativement significatives ($\sim 0.1 - 0.2 \text{ GHz}$), lorsque comparées à la largeur de certaines résonances ($\gamma \sim 1 - 2 \text{ GHz}$) ; bien que le comportement général ne soit pas altéré, les courbes présentent donc une erreur numérique significative. La convergence de $(q\Gamma + \omega_r)$ est très semblable à celle de f_r et présente un taux de $p = 4.5$.

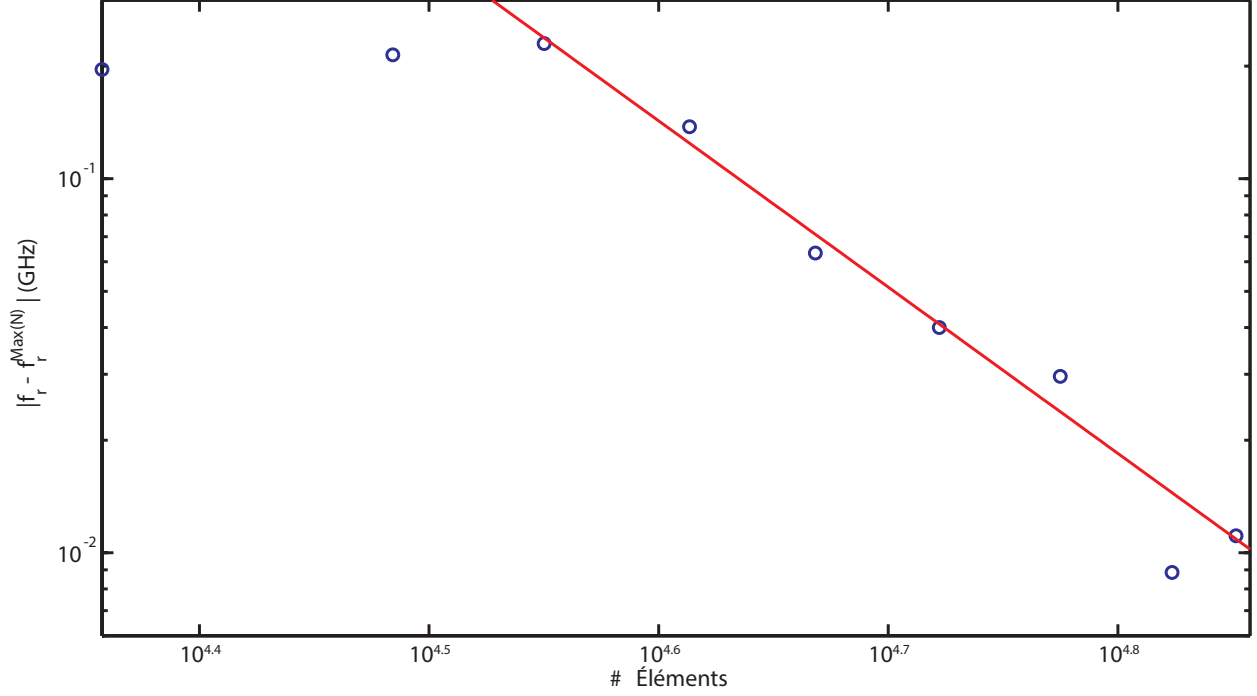


Figure 5.2 Convergence des $f_r = \omega_r/2\pi$ extraits à partir d'une régression des courbes de $|S_{21}|^2$. Les valeurs obtenues sont en bleu alors que la courbe de régression est en rouge. Le taux de convergence à N élevé est de $p = 4.45$.

5.2 Erreurs de modélisation

La méthode de calcul $k - \omega(k)$ est utilisée pour le calcul des diagrammes de bandes. Cette méthode est typiquement plus rapide que la méthode $\omega - k(\omega)$ et est déjà implémentée dans COMSOL. Dans notre cas, les matériaux sont faiblement dispersifs dans la bande de fréquence considérée et les bandes devraient donc être situées aux mêmes endroits dans le diagramme. Par contre, elle aurait permis la modélisation des pertes réelles dans le dispositif, puisqu'elles sont dispersives ($\epsilon'' \sim \omega^2$). L'effet de l'ajout de pertes dans le système est par contre discuté avec beaucoup de détails dans 3 lorsque qu'on étudie la transmission dans le système.

Les SRR sont modélisés comme étant des conducteurs parfaits. Dans les faits, la modélisation devrait utiliser un modèle de Drude (2.14) pour la permittivité des boucles. Cependant, avec une permittivité si large ($\epsilon' \sim 10^4$, $\epsilon'' \sim 10^6$), la longueur d'onde caractéristique devient très faible et le nombre d'éléments requis pour effectuer la simulation devient très large. Compte tenu du fait que la simulations est déjà limitée à ~ 10 périodes à la limite du critère de convergence habituel, il est impensable d'utiliser cette condition.

La présence de pertes dans le système est indispensable à une interprétation correcte de la convergence et des résultats. Les conditions frontières utilisées (conditions de ports) permettent à un certain nombre de modes de s'échapper du système par les faces (dans notre cas, HE_{11}). Les autres modes sont brutalement réfléchis par l'équivalent d'une condition métallique. Cette condition empêche l'énergie de s'échapper et pourrait causer des résonances de type Fabry-Pérot, qui apparaîtraient en dehors des singularités de Van Hove (condition $\beta L = n\pi/2$). Pour un système ayant des pertes (et donc une partie imaginaire de k), cette réflexion supplémentaire n'est pas significative si $k''L \gg 1$. Dans les travaux effectués, on remarque sur la figure 4.6, que pour $\epsilon''/\epsilon_0 = 0.05$, l'énergie stockée sur la face opposée à l'injection est beaucoup plus faible que sur la face où on a injecté et celle-ci est de nouveau atténuée si elle se propage dans la direction inverse. Une partie des pertes par radiations est également négligée par la présence des conditions périodiques dans les directions transverses, cet effet étant schématisé sur la figure 5.3. Généralement, ces pertes sont relativement faibles, surtout comparées au rayonnement dans les autres directions, mais elles pourraient avoir une influence si la résonance présente un facteur de qualité élevé. Les pertes par radiation dans la direction z sont exactes, puisque le recouvrement avec le mode HE_{11} sur les conditions de ports est nul. Le rayonnement est donc envoyé vers le PML par réflexion successives sur les conditions de ports, puis y est absorbé. Ce rayonnement est la source des pertes sur la figure 4.4 et est la seule dissipation d'énergie si $\epsilon'' = 0$.

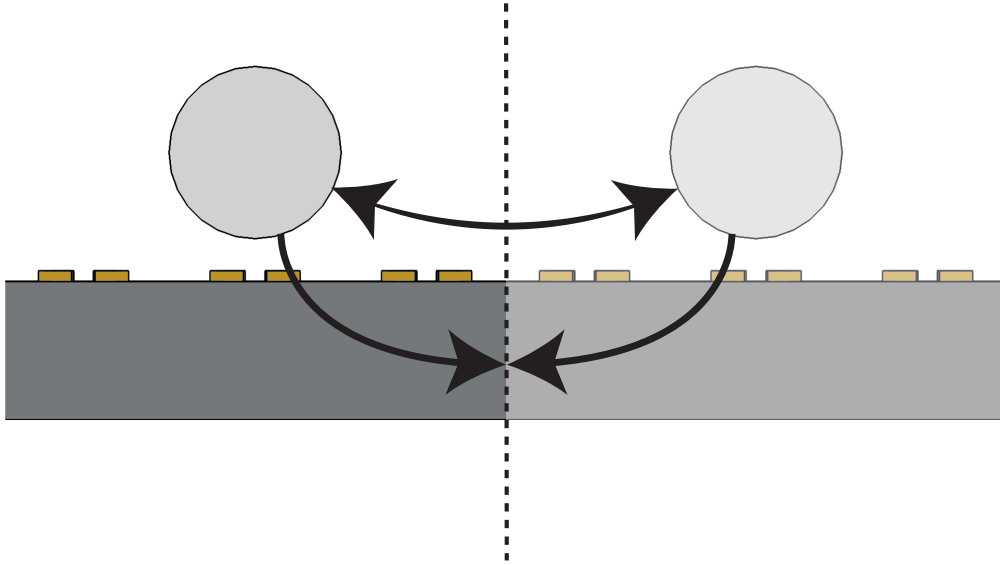


Figure 5.3 Schématisation de l'approximation faite par la condition frontière périodique. La condition copie la cellule élémentaire intégralement, incluant la fibre et la puissance injectée. La fibre peut donc échanger de l'énergie avec ses copies virtuelles.

5.3 Mesures Expérimentales

Des mesures expérimentales sur un système semblable à 3 ont été faites par Andrey Markov dans notre laboratoire. Ces expériences ont été faites avec une fibre de LDPE de $\sim 260 \mu\text{m}$ de diamètre produite sur notre tour d'étirage. Les SRR ont été produits par le groupe de M. Koch, professeur à Technische Universität Braunschweig. Ceux-ci sont des boucles d'or de $\sim 200 \text{ nm}$ de haut sur un substrat de verre de silice pur de $710 \mu\text{m}$ d'épais. Un signal provenant d'un système à THz-TDS a été injecté dans la fibre et collecté à la sortie pour analyse. Une mesure sur un substrat de $710 \mu\text{m}$ de verre de silice a également été faite afin d'obtenir une comparaison. Les résultats sont présentés sur la figure 5.4. Des mesures en transmission ont été faites pour différentes séparations entre la fibre et l'échantillon. Les courbes en noir-rouge sont pour le substrat seul et celles en vert-bleu sont pour la métasurface. L'échantillon est déplacé par un positionneur optomécanique, les chiffres dans la légende correspondent à la position de celui-ci. Pour une valeur de ~ 3 , la fibre est en contact avec l'échantillon.

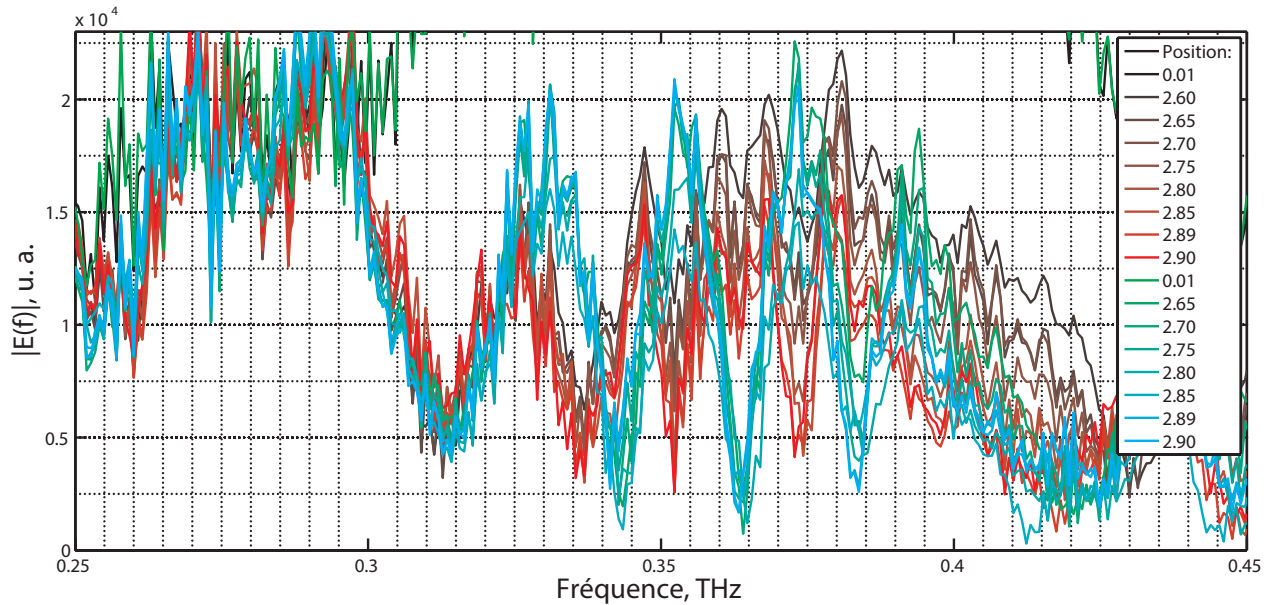


Figure 5.4 Mesure de la transmission du système fibre-métamatériau et fibre-substrat dans la plage spectrale de 0.25 THz - 0.4 THz. La résolution est de $\sim 1.5 \text{ GHz}$. Les oscillations périodiques semblent correspondre à un effet de Fabry-Pérot dans la lentille de Si. La légende montre le placement du nanopositionneur (en mm) pour la métasurface (courbe rouges) et pour le substrat seul (courbes vertes) ; la fibre est en contact avec la surface pour une valeur de $\sim 3.00 \text{ mm}$. Le niveau de bruit n'est pas discernable sur le graphique.

On note la grande quantité d'oscillations dans le système, qui semblent dues à un effet de Fabry-Pérot dans la lentille de Si utilisée dans le montage. Ces pics rendent la mesure

beaucoup plus difficile à interpréter puisqu'il s'agit de l'effet dominant dans la transmission. Une seule région spectrale semble montrer des différences importantes entre les courbes (soit entre 0.25 THz et 0.4 THz) et on constate peu de différences entre le substrat seul et la métasurface (le comportement est semblable). L'effet de la distance fibre-métasurface est également plus faible que ce qui est présenté dans le chapitre 3. Par contre, on doit mentionner que la hauteur des boucles entre l'échantillon analysé (~ 200 nm) et celui calculé ($\sim 25 - 50$ μm) diffère de plus de deux ordres de grandeur, ce qui peut influencer grandement sur les résultats. Dans le calcul théorique cette épaisseur est comparable à la taille de la fibre (~ 260 μm en laboratoire) et à celle du substrat ($\sim 300 - 700$ μm), particulièrement si l'on considère que près d'une résonance, la permittivité devient relativement grande.

Les prochaines étapes du projet seraient donc d'effectuer la fabrication d'une métasurface ayant une épaisseur de l'ordre d'une dizaine de microns afin de vérifier les résultats théoriques. Le groupe du laboratoire de microfabrication de polytechnique a d'ailleurs été contacté afin d'en étudier la possibilité.

CHAPITRE 6

CONCLUSIONS

6.1 Synthèse des travaux

Ce mémoire a d'abord présenté le problème des mesures dans les fréquences THz. Dans ce cas, on parle notamment de la source qui est de relativement grande taille et de la méthode traditionnelle de mesure en THz-TDS, qui demande l'utilisation d'un faisceau libre pour l'interrogation des dispositifs. La solution proposée est d'utiliser un guide d'onde pour effectuer l'acheminement de la puissance vers le dispositifs et pour le retour du signal, pour analyse.

Puisque les FSS ont récemment montré des sensibilités élevées, le mémoire s'est intéressé au couplage de la puissance par une fibre, dans une direction parallèle à la surface. Cette géométrie permet une simplicité remarquable du dispositif lorsqu'intégré, par exemple, dans une chaîne de production. Alors que l'implémentation est simple, l'étude des propriétés du coupleur ne l'est pas. Le premier article, soit le chapitre 3, le montre bien. Le calcul requiert l'utilisation d'un système 3D, ce qui peut devenir excessivement long.

Cet article étudie d'abord le diagramme de bande du système afin de montrer qu'il existe un grand nombre de modes de propagation, qui sont en fait des mélanges de modes résonants de SRR et de substrat; ceux-ci étant fortement couplés avec les modes de fibre optique. Lorsque le système atteint une résonance, c'est-à-dire, un point de courbure nulle dans le diagramme, la réflexion devient grande. La largeur spectrale de ce pic de transmission n'est pas explicitement reliée aux propriétés du diagramme de bande; les quelques études que nous avons menées semblent montrer des dépendances compliquées. On a également montré que ces résonances n'ont pas des distributions de champ orthogonales, c'est-à-dire, qu'elles peuvent échanger de l'énergie si les fréquences de résonances sont suffisamment proches. Cet échange mène, tel que montré dans 2.3, à un profil de résonance dit de Fano ou EIT-like.

Dans un second temps, on a étudié les propriétés d'un senseur basé sur ces résonances dites de Fano, permettant de mesurer l'épaisseur d'une couche de papier, ainsi que sa teneur en eau. Puisque le mode résonant est un mélange des modes de substrat et de SRR, l'ajout d'une couche additionnelle change les propriétés de la résonance, soit la fréquence de résonance, ω_r , ainsi que les pertes associées à la résonance Γ . On relie le changement d'épaisseur de la couche

ajoutée au changement de ω_r , alors que le changement de la quantité d'eau dans la couche influe sur Γ . L'utilisation d'un diagramme de bande permet de prédire les changements de ω_r , relativement bien, alors que le changement d'amplitude de réflexion nécessite un calcul direct. Théoriquement, il est possible d'atteindre une limite de détection de $10\ \mu\text{m}$ en épaisseur et de 0.02% V/V d'eau.

Des premières mesures expérimentales ont été faites par A. Markov sur un échantillon fourni par le professeur M. Koch. L'échantillon utilisé est fort différent de ce qui a été utilisé pour effectuer les calculs théoriques, par plus de deux ordres de grandeur. Les résultats sont décevants puisqu'on note un comportement très différent de ce qui était attendu, potentiellement dû à un Fabry-Pérot dans la lentille de Si du système.

6.2 Limitations de la solution proposée

Les applications de dispositifs fibre-métasurface sont fortement limitées par la présence de pertes dans le système. Celles-ci ont pour effet de diminuer la réflexion à résonance (et d'augmenter la transmission à résonance). Cette grande sensibilité a été utilisée pour produire un capteur dans le chapitre 4, mais le système tolère alors peu de pertes, surtout si on les compare aux valeurs typiques dans les THz. Le système est donc limité aux matériaux ayant de faibles pertes (LDPE, PTFE, pour $f \lesssim 500\ \text{GHz}$, Si obtenu par zone fondue, etc.), ce qui limite fortement les milieux potentiels d'application. L'utilisation de matériaux cristallins purs afin de limiter les pertes induit un coût supplémentaire, le Si obtenu par zone fondue étant plus cher que celui cru par procédé Czochralski, par exemple. On note également qu'il n'existe pas de source peu dispendieuse pour l'opération d'un tel dispositif en pratique. Une implémentation industrielle nécessite donc un volume suffisamment grand pour absorber le coût relié au dispositif.

6.3 Améliorations futures

Le coupleur nécessite encore plusieurs vérifications expérimentales. D'abord, il faudrait vérifier que sur un substrat ayant peu de pertes (Si à zone fondue) et avec des boucles de quelques dizaines de microns de haut, on soit en état de mesurer les résonances prédites dans le chapitre 3. Dans ce cas, il serait d'intérêt d'étudier les autres variations de métasurfaces, les SRR étant un type de métasurface relativement simple. D'autres métasurfaces peuvent être exploitées, dont les métasurfaces accordables, permettant d'ajuster la transmission à volonté dans le dispositif.

On note également que d'autres types de guides peuvent être employés. Dans ce cas, il serait possible de faire varier le couplage et d'augmenter la largeur spectrale des résonances si des guides avec un confinement moindre sont utilisés.

RÉFÉRENCES

- [1] J. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, “Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena,” *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, vol. 47, no. 11, pp. 2075–2084, 1999.
- [2] C. Jansen, I. A. I. Al-Naib, N. Born, and M. Koch, “Terahertz metasurfaces with high Q-factors,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, JAN 31 2011.
- [3] J. Hao, Q. Ren, Z. An, X. Huang, Z. Chen, M. Qiu, and L. Zhou, “Optical metamaterial for polarization control,” *Physical Review A*, vol. 80, p. 023807, Aug 2009.
- [4] C. Debus and P. H. Bolivar, “Frequency selective surfaces for high sensitivity terahertz sensing,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 18, pp. –, 2007.
- [5] H.-T. Chen, W. J. Padilla, J. M. O. Zide, A. C. Gossard, A. J. Taylor, and R. D. Averitt, “Active terahertz metamaterial devices,” *Nature*, vol. 444, pp. 597–600, 2006.
- [6] M. Naftaly and R. E. Miles, “Terahertz time-domain spectroscopy for material characterization,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 95, pp. 1658–1665, Aug 2007.
- [7] B. Ung, A. Mazhorova, A. Dupuis, M. Rozé, and M. Skorobogatiy, “Polymer microstructured optical fibers for terahertz wave guiding,” *Opt. Express*, vol. 19, pp. B848–B861, Dec 2011.
- [8] M. Goto, A. Quema, H. Takahashi, S. Ono, and N. Sarukura, “Teflon photonic crystal fiber as terahertz waveguide,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 43, no. 2B, p. L317, 2004.
- [9] D. Grischkowsky, S. Keiding, M. van Exter, and C. Fattinger, “Far-infrared time-domain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 7, pp. 2006–2015, Oct 1990.
- [10] M. Skorobogatiy, *Nanostructured and Subwavelength Waveguides : Fundamentals and Applications*. Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications, Wiley, 2012.
- [11] S. Atakramians, S. A. V., B. M. Fischer, D. Abbott, and T. M. Monroe, “Porous fibers : a novel approach to low loss thz waveguides,” *Opt. Express*, vol. 16, pp. 8845–8854, Jun 2008.
- [12] A. Hassani, A. Dupuis, and M. Skorobogatiy, “Low loss porous terahertz fibers containing multiple subwavelength holes,” *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 7, pp. –, 2008.

- [13] H. Han, H. Park, M. Cho, and J. Kim, "Terahertz pulse propagation in a plastic photonic crystal fiber," *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 15, pp. 2634–2636, 2002.
- [14] R. Mendis and D. Grischkowsky, "Undistorted guided-wave propagation of subpicosecond terahertz pulses," *Opt. Lett.*, vol. 26, pp. 846–848, Jun 2001.
- [15] K. Wang and D. M. Mittleman, "Metal wires for terahertz wave guiding," *Nature*, vol. 432, pp. 376–379, 2004.
- [16] V. G. Veselago, "The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ ," *Soviet Physics Uspekhi*, vol. 10, no. 4, p. 509, 1968.
- [17] J. Pendry, A. Holden, W. Stewart, and I. Youngs, "Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures," *Physical Review Letters*, vol. 76, pp. 4773–4776, JUN 17 1996.
- [18] R. Clausius, *Die mechanische U'grmetheorie 2*. 1879.
- [19] O.-F. Mossotti, *Mem. di mathem. e fisica in Modena. 24 11*. 1850.
- [20] G. Eleftheriades, A. Iyer, and P. Kremer, "Planar negative refractive index media using periodically l-c loaded transmission lines," *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, vol. 50, pp. 2702–2712, Dec 2002.
- [21] Z. Li, K. Aydin, and E. Ozbay, "Determination of the effective constitutive parameters of bianisotropic metamaterials from reflection and transmission coefficients," *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 026610, Feb 2009.
- [22] D. R. Smith, D. C. Vier, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, "Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials," *Phys. Rev. E*, vol. 71, p. 036617, Mar 2005.
- [23] A. Nicolson and G. F. Ross, "Measurement of the intrinsic properties of materials by time-domain techniques," *Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions on*, vol. 19, pp. 377–382, Nov 1970.
- [24] X. Chen, T. M. Grzegorzczak, B.-I. Wu, J. Pacheco, and J. A. Kong, "Robust method to retrieve the constitutive effective parameters of metamaterials," *Phys. Rev. E*, vol. 70, p. 016608, Jul 2004.
- [25] C. Menzel, T. Paul, C. Rockstuhl, T. Pertsch, S. Tretyakov, and F. Lederer, "Validity of effective material parameters for optical fishnet metamaterials," *Physical Review B*, vol. 81, JAN 2010.
- [26] B. A. Munk, *Frequency selective surfaces : theory and design*. John Wiley & Sons, 2005.
- [27] N. Papasimakis, Y. H. Fu, V. A. Fedotov, S. L. Prosvirnin, D. P. Tsai, and N. I. Zheludev, "Metamaterial with polarization and direction insensitive resonant transmission response

- mimicking electromagnetically induced transparency,” *Applied Physics Letters*, vol. 94, MAY 25 2009.
- [28] X. Shen, T. J. Cui, J. Zhao, H. F. Ma, W. X. Jiang, and H. Li, “Polarization-independent wide-angle triple-band metamaterial absorber,” *Optics Express*, vol. 19, pp. 9401–9407, MAY 9 2011.
- [29] I. Gil, J. Bonache, J. Garcia-Garcia, and F. Martin, “Tunable metamaterial transmission lines based on varactor-loaded split-ring resonators,” *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, vol. 54, pp. 2665–2674, June 2006.
- [30] T. Driscoll, G. O. Andreev, D. N. Basov, S. Palit, S. Y. Cho, N. M. Jokerst, and D. R. Smith, “Tuned permeability in terahertz split-ring resonators for devices and sensors,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 6, pp. –, 2007.
- [31] X. Xu, B. Peng, D. Li, J. Zhang, L. M. Wong, Q. Zhang, S. Wang, and Q. Xiong, “Flexible visible-infrared metamaterials and their applications in highly sensitive chemical and biological sensing,” *Nano Letters*, vol. 11, no. 8, pp. 3232–3238, 2011.
- [32] V. A. Fedotov, M. Rose, S. L. Prosvirnin, N. Papasimakis, and N. I. Zheludev, “Sharp trapped-mode resonances in planar metamaterials with a broken structural symmetry,” *Physical Review Letters*, vol. 99, p. 147401, Oct 2007.
- [33] R. Singh, I. A. I. Al-Naib, M. Koch, and W. Zhang, “Sharp Fano resonances in THz metamaterials,” *Optics Express*, vol. 19, pp. 6312–6319, MAR 28 2011.
- [34] S. Fan, W. Suh, and J. D. Joannopoulos, “Temporal coupled-mode theory for the fano resonance in optical resonators,” *Journal of the Optical Society of America A*, vol. 20, pp. 569–572, Mar 2003.
- [35] W. Suh, Z. Wang, and S. Fan, “Temporal coupled-mode theory and the presence of non-orthogonal modes in lossless multimode cavities,” *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 40, no. 10, pp. 1511–1518, 2004.
- [36] H. A. Haus, *Waves and Fields in Optoelectronics*. Prentice-Hall (Englewood Cliffs, NJ, 1984.
- [37] U. Fano, “Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts,” *Physical Review*, vol. 124, no. 6, p. 1866, 1961.
- [38] M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, “Electromagnetically induced transparency : Optics in coherent media,” *Review of Modern Physics*, vol. 77, pp. 633–673, Jul 2005.
- [39] D. Banerjee, W. von Spiegel, M. D. Thomson, S. Schabel, and H. G. Roskos, “Diagnosing water content in paper by terahertz radiation,” *Opt. Express*, vol. 16, pp. 9060–9066, Jun 2008.

- [40] B. You, J.-Y. Lu, J.-H. Liou, C.-P. Yu, H.-Z. Chen, T.-A. Liu, and J.-L. Peng, “Sub-wavelength film sensing based on terahertz anti-resonant reflecting hollow waveguides,” *Opt. Express*, vol. 18, pp. 19353–19360, Aug 2010.
- [41] M. Wachter, M. Nagel, and H. Kurz, “Fluidic channel waveguide coupler for nl-volume sensing applications,” in *Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 2009. IRMMW-THz 2009. 34th International Conference on*, pp. 1–2, Sept 2009.
- [42] J. Zhang and D. Grischkowsky, “Waveguide terahertz time-domain spectroscopy of nanometer water layers,” *Opt. Lett.*, vol. 29, pp. 1617–1619, Jul 2004.
- [43] J. S. Melinger, S. S. Harsha, N. Laman, and D. Grischkowsky, “Guided-wave terahertz spectroscopy of molecular solids [invited],” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 26, pp. A79–A89, Sep 2009.
- [44] J. S. Melinger, N. Laman, and D. Grischkowsky, “The underlying terahertz vibrational spectrum of explosives solids,” *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 1, pp. –, 2008.
- [45] M. Nagel, P. H. Bolivar, and H. Kurz, “Modular parallel-plate thz components for cost-efficient biosensing systems,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 20, no. 7, p. S281, 2005.
- [46] R. Mendis, V. Astley, J. Liu, and D. M. Mittleman, “Terahertz microfluidic sensor based on a parallel-plate waveguide resonant cavity,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 17, pp. –, 2009.
- [47] M. Nagel and H. Kurz, “Corrugated waveguide based genomic biochip for marker-free thz read-out,” *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, vol. 27, no. 4, pp. 517–529, 2006.
- [48] Y. Sun, X. Xia, H. Feng, H. Yang, C. Gu, and L. Wang, “Modulated terahertz responses of split ring resonators by nanometer thick liquid layers,” *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 22, pp. –, 2008.
- [49] J. F. O’Hara, R. Singh, I. Brener, E. Smirnova, J. Han, A. J. Taylor, and W. Zhang, “Thin-film sensing with planar terahertz metamaterials : sensitivity and limitations,” *Opt. Express*, vol. 16, pp. 1786–1795, Feb 2008.
- [50] X. G. Peralta, M. C. Wanke, C. L. Arrington, J. D. Williams, I. Brener, A. Strikwerda, R. D. Averitt, W. J. Padilla, E. Smirnova, A. J. Taylor, and J. F. O’Hara, “Large-area metamaterials on thin membranes for multilayer and curved applications at terahertz and higher frequencies,” *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 16, pp. –, 2009.
- [51] H. Tao, A. C. Strikwerda, M. Liu, J. P. Mondia, E. Ekmekci, K. Fan, D. L. Kaplan, W. J. Padilla, X. Zhang, R. D. Averitt, and F. G. Omenetto, “Performance enhancement

- of terahertz metamaterials on ultrathin substrates for sensing applications,” *Applied Physics Letters*, vol. 97, no. 26, pp. –, 2010.
- [52] H. Tao, A. C. Strikwerda, K. Fan, C. M. Bingham, W. J. Padilla, X. Zhang, and R. D. Averitt, “Terahertz metamaterials on free-standing highly-flexible polyimide substrates,” *Journal of Physics D : Applied Physics*, vol. 41, no. 23, p. 232004, 2008.
- [53] S.-Y. Chiam, R. Singh, J. Gu, J. Han, W. Zhang, and A. A. Bettiol, “Increased frequency shifts in high aspect ratio terahertz split ring resonators,” *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 6, pp. –, 2009.
- [54] J. Nedelec, “Mixed finite elements in R^3 ,” *Numerische Mathematik*, vol. 35, no. 3, pp. 315–341, 1980.
- [55] J. Nédélec, “A new family of mixed finite elements in R^3 ,” *Numerische Mathematik*, vol. 50, no. 1, pp. 57–81, 1986.
- [56] K. Fumio, “Mixed and penalty formulations for finite element analysis of an eigenvalue problem in electromagnetism,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 64, no. 1–3, pp. 509 – 521, 1987.
- [57] A. Bossavit and I. Mayergoyz, *Computational Electromagnetism : Variational Formulations, Complementarity, Edge Elements*. Electromagnetism, Elsevier Science, 1998.
- [58] C. Fietz, Y. Urzhumov, and G. Shvets, “Complex k band diagrams of 3d metamaterial/photonic crystals,” *Opt. Express*, vol. 19, pp. 19027–19041, Sep 2011.
- [59] Y. Zhao and A. Alù, “Manipulating light polarization with ultrathin plasmonic metasurfaces,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 205428, Nov 2011.
- [60] D. Sievenpiper, J. Schaffner, H. Song, R. Loo, and G. Tangonan, “Two-dimensional beam steering using an electrically tunable impedance surface,” *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 51, pp. 2713–2722, Oct 2003.
- [61] A. Alù, “Mantle cloak : Invisibility induced by a surface,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 245115, Dec 2009.
- [62] I. A. I. Al-Naib, C. Jansen, N. Born, and M. Koch, “Polarization and angle independent terahertz metamaterials with high q-factors,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 9, pp. –, 2011.
- [63] C. Jansen, I. A. I. Al-Naib, N. Born, and M. Koch, “Terahertz metasurfaces with high q-factors,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 5, pp. –, 2011.
- [64] M. Skorobogatiy and J. Yang, *Fundamentals of Photonic Crystal Guiding*. New York, NY, USA : Cambridge University Press, 1st ed., 2009.

- [65] J. Han and A. Lakhtakia, “Semiconductor split-ring resonators for thermally tunable terahertz metamaterials,” *Journal of Modern Optics*, vol. 56, no. 4, pp. 554–557, 2009.
- [66] K. Aydin, I. M. Pryce, and H. A. Atwater, “Symmetry breaking and strong coupling in planar optical metamaterials,” *Opt. Express*, vol. 18, pp. 13407–13417, Jun 2010.
- [67] Y. Xu, Y. Li, R. K. Lee, and A. Yariv, “Scattering-theory analysis of waveguide-resonator coupling,” *Phys. Rev. E*, vol. 62, pp. 7389–7404, Nov 2000.
- [68] D. D. Smith, H. Chang, K. A. Fuller, A. T. Rosenberger, and R. W. Boyd, “Coupled-resonator-induced transparency,” *Phys. Rev. A*, vol. 69, p. 063804, Jun 2004.
- [69] Q. Xu, S. Sandhu, M. L. Povinelli, J. Shakya, S. Fan, and M. Lipson, “Experimental realization of an on-chip all-optical analogue to electromagnetically induced transparency,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 123901, Mar 2006.
- [70] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, “Fano resonances in nanoscale structures,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 2257–2298, Aug 2010.
- [71] L. Verslegers, Z. Yu, Z. Ruan, P. B. Catrysse, and S. Fan, “From electromagnetically induced transparency to superscattering with a single structure : A coupled-mode theory for doubly resonant structures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 083902, Feb 2012.
- [72] S. Fan and J. D. Joannopoulos, “Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs,” *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 235112, Jun 2002.
- [73] A. Faraon, I. Fushman, D. Englund, N. Stoltz, P. Petroff, and J. Vuckovic, “Dipole induced transparency in waveguide coupled photonic crystal cavities,” *Opt. Express*, vol. 16, pp. 12154–12162, Aug 2008.
- [74] R. D. Kekatpure, E. S. Barnard, W. Cai, and M. L. Brongersma, “Phase-coupled plasmon-induced transparency,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, p. 243902, Jun 2010.
- [75] M. Consales, A. Ricciardi, A. Crescitelli, E. Esposito, A. Cutolo, and A. Cusano, “Lab-on-fiber technology : Toward multifunctional optical nanoprobe,” *ACS Nano*, vol. 6, no. 4, pp. 3163–3170, 2012.
- [76] T. Srivastava, R. Das, and R. Jha, “Highly accurate and sensitive surface plasmon resonance sensor based on channel photonic crystal waveguides,” *Sensors and Actuators B : Chemical*, vol. 157, no. 1, pp. 246 – 252, 2011.
- [77] S. Fan, “Sharp asymmetric line shapes in side-coupled waveguide-cavity systems,” *Applied Physics Letters*, vol. 80, pp. 908–910, Feb 2002.
- [78] M. Popovic, C. Manolatou, and M. Watts, “Coupling-induced resonance frequency shifts in coupled dielectric multi-cavity filters,” *Opt. Express*, vol. 14, pp. 1208–1222, Feb 2006.

- [79] M. Decker, R. Zhao, C. M. Soukoulis, S. Linden, and M. Wegener, “Twisted split-ring-resonator photonic metamaterial with huge optical activity,” *Opt. Lett.*, vol. 35, pp. 1593–1595, May 2010.
- [80] H.-T. Chen, W. J. Padilla, M. J. Chich, A. K. Azad, R. D. Averitt, and A. J. Taylor, “A metamaterial solid-state terahertz phase modulator,” *Nat. Photon.*, vol. 3, no. 3, pp. 148–151, 2009.
- [81] M. Girard and M. Skorobogatiy, “Probing terahertz metamaterials with subwavelength optical fibers,” *Opt. Express*, vol. 21, pp. 17195–17211, Jul 2013.
- [82] C. Wu, A. B. Khanikaev, R. Adato, N. Arju, A. A. Yanik, H. Altug, and G. Shvets, “Fano-resonant asymmetric metamaterials for ultrasensitive spectroscopy and identification of molecular monolayers,” *Nat. Mater.*, vol. 11, pp. 69–75.
- [83] C. Buzea and K. Robbie, “State of the art in thin film thickness and deposition rate monitoring sensors,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 68, no. 2, p. 385, 2005.
- [84] R. Münch, “Control systems for control machines,” in *Handbook of paper and board* (H. Holik, ed.), pp. 401–421, Wiley-Vch, 2006.
- [85] P. Mousavi, F. Haran, D. Jez, F. Santosa, and J. S. Dodge, “Simultaneous composition and thickness measurement of paper using terahertz time-domain spectroscopy,” *Appl. Opt.*, vol. 48, pp. 6541–6546, Nov 2009.
- [86] C. Jördens, M. Scheller, B. Breitenstein, D. Selmar, and M. Koch, “Evaluation of leaf water status by means of permittivity at terahertz frequencies,” *Journal of Biological Physics*, vol. 35, no. 3, pp. 255–264, 2009.
- [87] B. Hussain, M. Ahmed, M. Nawaz, M. Saleem, M. Razzaq, M. A. Zia, and M. Iqbal, “Simultaneous determination of thickness and refractive index based on time-of-flight measurements of terahertz pulse,” *Appl. Opt.*, vol. 51, pp. 5326–5330, Jul 2012.
- [88] T. Hattori, H. Kumon, and H. Tamazumi, “Terahertz spectroscopic characterization of paper,” in *Infrared Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 2010 35th International Conference on*, pp. 1–2, Sept 2010.
- [89] M. N. Afsar and J. B. Hasted, “Measurements of the optical constants of liquid h₂O and d₂O between 6 and 450 cm⁻¹,” *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 67, pp. 902–904, Jul 1977.
- [90] J. Vij, D. Simpson, and O. Panarina, “Far infrared spectroscopy of water at different temperatures : {GHz} to {THz} dielectric spectroscopy of water,” *Journal of Molecular Liquids*, vol. 112, no. 3, pp. 125 – 135, 2004.
- [91] G. Yan, A. Markov, Y. Chinifooroshan, S. M. Tripathi, W. J. Bock, and M. Skorobogatiy, “Resonant thz sensor for paper quality monitoring using thz fiber bragg gratings,” *Opt. Lett.*, vol. 38, pp. 2200–2202, Jul 2013.

- [92] J. Birch, J. Dromey, and J. Lesurf, “The optical constants of some common low-loss polymers between 4 and 40 cm^{-1} ,” *Infrared Physics*, vol. 21, no. 4, pp. 225 – 228, 1981.
- [93] B. Reinhard, K. M. Schmitt, V. Wollrab, J. Neu, R. Beigang, and M. Rahm, “Meta-material near-field sensor for deep-subwavelength thickness measurements and sensitive refractometry in the terahertz frequency range,” *Applied Physics Letters*, vol. 100, no. 22, pp. –, 2012.