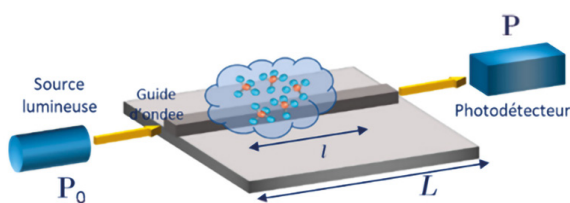


LA SPECTROSCOPIE INFRAROUGE EN PHOTONIQUE INTÉGRÉE COMME MESURE DE DÉTECTION DE MOLÉCULES À L'ÉTAT DE TRACE

Sofiane MEZIANI, Nathalie LORRAIN, Loïc BODIOU et Joël CHARRIER*

Université de Rennes, CNRS, Institut Foton-UMR 6082, 22305 Lannion, France

*joel.charrier@univ-rennes.fr



Cet article présente les principes de détection utilisant la spectroscopie infrarouge en photonique intégrée, en mettant en évidence les paramètres clés ainsi que leur ingénierie. Il décrit également les principales architectures de guides d'onde intégrés utilisées, et propose un état de l'art non exhaustif des molécules ayant été détectées démontrant la versatilité de cette technique.

<https://doi.org/10.1051/photon/202613829>

Article publié en accès libre sous les conditions définies par la licence Creative Commons Attribution License CC-BY (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0>), qui autorise sans restrictions l'utilisation, la diffusion, et la reproduction sur quelque support que ce soit, sous réserve de citation correcte de la publication originale.

Le domaine du moyen infrarouge, généralement défini dans la plage spectrale s'étendant de 2 à 20 μm , suscite un intérêt croissant en raison de sa richesse informationnelle unique. Dans cette région du spectre électromagnétique, de nombreuses molécules présentent des bandes d'absorption caractéristiques correspondant à leurs modes ro-vibrationnels fondamentaux. Cette propriété confère au MIR un rôle central pour

l'analyse chimique et biologique, permettant une détection sélective et sensible sans marquage. Ainsi, les technologies exploitant le moyen infrarouge trouvent des applications variées, allant de la surveillance environnementale au diagnostic biomédical, en passant par le contrôle des procédés industriels et la défense.

Parallèlement, les avancées en photonique intégrée ont ouvert la voie à la miniaturisation et à l'intégration de fonctions optiques complexes sous forme de

dispositifs compacts. Ces systèmes reposent sur la propagation guidée de la lumière au sein de structures de dimensions micro- ou nanométriques, telles que des guides d'onde, des résonateurs ou des interféromètres, fabriqués à partir de matériaux dont les propriétés optiques sont transparentes avec le domaine infrarouge (par exemple, le silicium, le germanium ou les verres de chalcogénures). La photonique intégrée permet ainsi de concevoir des dispositifs ●●●

robustes, moins énergivore et à bas coût, tout en offrant des performances élevées en termes de sensibilité, de limite de détection (LoD) et de résolution spectrale.

L'intégration de ces plateformes photoniques avec la microfluidique constitue une approche particulièrement prometteuse pour le développement de laboratoires sur puce (lab-on-chip) par spectroscopie infrarouge. La microfluidique permet la manipulation précise de faibles volumes de fluides au sein de canaux miniaturisés, facilitant le contrôle des conditions expérimentales et réduisant la consommation d'échantillons et de réactifs. En combinant ces deux technologies, il devient possible de réaliser des systèmes analytiques compacts capables d'effectuer des analyses en temps réel, *in situ* et avec un haut degré d'automatisation permettant un déploiement sur site et évitant ainsi le prélèvement et la mesure analytique ultérieure en laboratoire.

Dans ce contexte, le développement de dispositifs intégrés opérant dans le moyen infrarouge représente un enjeu scientifique et technologique majeur. Ces systèmes visent à exploiter pleinement les signatures spectrales moléculaires tout en bénéficiant des avantages de l'intégration et de la miniaturisation, ouvrant ainsi la voie à de nouvelles générations de capteurs compacts, portables, performants et multifonctionnels.

Cet article s'articule autour de trois volets principaux. Tout d'abord, le principe de détection est introduit en mettant en évidence les paramètres clés de l'interaction onde-matière, tels que le facteur de confinement externe, la sensibilité et la limite de détection (LoD), ainsi que les principales techniques spectroscopiques pour améliorer cette limite de détection. Ensuite, différentes architectures de transduction en photonique intégrée sont présentées, incluant les approches par onde évanescente, les structures à fort confinement et la détection volumique à base de matériaux poreux, avec un aperçu comparatif des performances issues de la littérature. Enfin, cet article se conclut par des perspectives offertes par les plateformes photoniques intégrées dans le moyen infrarouge.

PRINCIPE DE TRANSDUCTION EN PHOTONIQUE INTÉGRÉE

Les paramètres clefs de dimensionnement de l'optimisation de l'interaction onde-matière en photonique intégrée

Le principe de détection en spectroscopie infrarouge repose généralement sur l'atténuation de la lumière

par une espèce moléculaire absorbante le long de la partie transductrice d'un guide d'onde monomode comme illustré sur la figure 1.

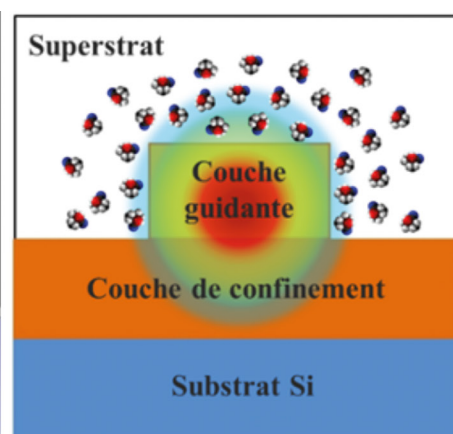
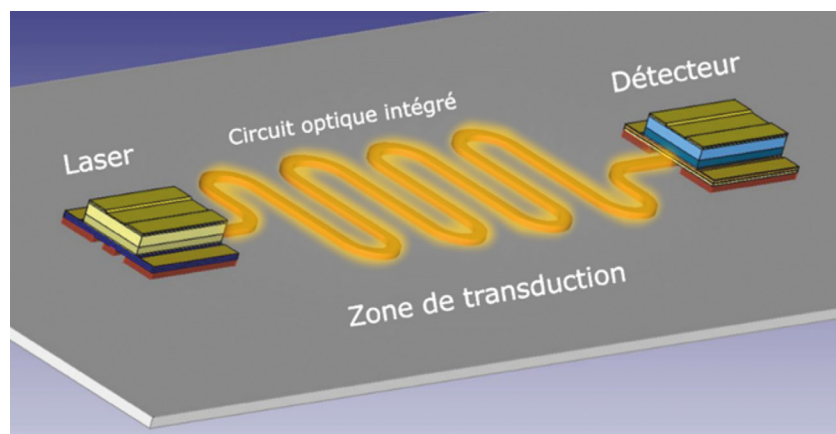
Le paramètre le plus approprié en optique intégrée pour calculer la fraction du champ électromagnétique en contact avec l'analyte est le facteur de confinement externe Γ [1]. Ce paramètre est obtenu en exprimant la sensibilité du guide d'onde aux variations de l'indice de réfraction du superstrat tel que :

$$\Gamma = \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial n_{\text{superstrat}}} = \frac{n_g}{n_{\text{superstrat}}} = \frac{\iint_{\text{superstrat}} \epsilon |\vec{E}|^2 dx dy}{\iint_{\infty} \epsilon |\vec{E}|^2 dx dy}$$

Avec n_{eff} l'indice effectif du mode propagé dans le guide transducteur, $n_{\text{superstrat}}$ l'indice du milieu à sonder, n_g l'indice de groupe et ϵ la permittivité.

Dans certains cas, Γ peut dépasser l'unité, ce qui indique qu'un gain par unité de longueur supérieur à celui obtenu en espace libre peut être atteint. Cela s'explique par le fait que, au-delà du simple confinement spatial de l'énergie du champ électrique, Γ intègre également l'effet de l'indice de groupe [1]. Le dimensionnement

Figure 1. (a) Représentation schématique d'un capteur optique intégré compact qui regroupe sur le même substrat la source lumineuse, le guide d'onde de longueur L , la partie transductrice de longueur l inférieure à L et le détecteur, (b) Schéma transversal d'un guide d'onde avec la présence de molécules absorbantes dans le superstrat.



du guide d'onde en termes géométrique et de contraste d'indice permettrait d'optimiser cette valeur.

Le signal propagé va alors subir une atténuation qui va se rajouter à celle engendrée par les pertes de propagation de la structure guidante. La relation de Beer-Lambert s'écrit donc en tenant en compte de l'atténuation des molécules à détecter :

$$P(\lambda) = p_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)L - \Gamma(\lambda)\epsilon(\lambda)Cl}$$

Avec P et P_0 les puissances optiques respectivement à la sortie et à l'entrée du guide, α les pertes de propagation de la plateforme, L la longueur du guide d'onde, Γ le facteur de confinement externe, ϵ le coefficient d'absorption molaire, C la concentration des molécules absorbantes et l la longueur d'interaction entre les molécules absorbantes et le mode optique.

Ainsi, la sensibilité du dispositif est définie comme la variation de la puissance optique de sortie en fonction de la concentration de l'analyte C . Elle peut être déterminée en dérivant l'expression précédente par rapport à C [1, 2]

$$S = \left| \frac{dP(\lambda)}{dC} \right| \Gamma(\lambda)\epsilon(\lambda)l p_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)L - \Gamma(\lambda)\epsilon(\lambda)Cl}$$

Il existe ainsi à partir de cette relation, une longueur optimale l_{opt} de la partie transductrice pour laquelle la sensibilité est maximale telle que :

$$l_{opt} = \frac{1}{\Gamma(\lambda)\epsilon C + \alpha(\lambda)}$$

La concentration minimale de l'analyte notée C_{min} mesurable par le capteur représente donc la limite de détection (LoD). Ainsi, en prenant en compte l'ensemble de la chaîne de mesure, la puissance optique minimale P_{min} détectable par le détecteur est définie comme la différence entre la puissance optique correspondant à une concentration nulle $P(C=0)$ et la puissance optique pour cette concentration minimale [2]. Elle dépend des caractéristiques du photodétecteur infrarouge (la puissance équivalente de bruit (NEP), la bande passante (B) et le rapport signal sur bruit (SNR) qui tient compte des pertes de couplage à l'entrée et à la sortie du guide d'onde) et s'écrit selon

la relation suivante :

$$P_{min} = P(C=0) - P(C_{min}) = SNR NEP \sqrt{B}$$

Ainsi en utilisant les caractéristiques du photodétecteur infrarouge et les équations précédentes, il est possible d'exprimer C_{min} comme suit :

$$C_{min} = \frac{-\ln \left[1 - \frac{SNR NEP \sqrt{B}}{P_{0exp}(-\alpha L_{opt})} \right]}{\Gamma \epsilon L_{opt}}$$

Ainsi, ce paragraphe établit les critères de conception des guides d'onde en tant que transducteur, notamment le dimensionnement géométrique du guide et son contraste d'indice en vue d'optimiser le facteur de confinement externe Γ . Il souligne en outre que la limite de détection dépend de l'ensemble de la chaîne de mesure, dont l'optimisation conditionne l'obtention d'une sensibilité maximale et, par conséquent, d'une LoD minimale.

Techniques de détection par spectroscopie infrarouge

Les principales techniques de spectroscopie d'absorption dans le moyen infrarouge reposent sur des approches différentes pour mesurer l'atténuation de la lumière par une espèce moléculaire cible en fonction de la longueur d'onde. Elles se distinguent par leur complexité instrumentale, leur sensibilité et leur robustesse face au bruit.

Ainsi, la spectroscopie d'absorption par détection directe (Direct Absorption Spectroscopy, DAS) consiste à mesurer directement la diminution d'intensité de la lumière guidée après interaction avec les molécules cibles, en fonction de la longueur d'onde. Simple à mettre en œuvre et directement interprétable, elle permet d'obtenir un spectre large selon la source utilisée mais reste limitée en sensibilité, notamment en raison de sa forte dépendance aux fluctuations de puissance de la source et aux paramètres du détecteur comme démontré dans le paragraphe précédent.

Afin d'améliorer la sélectivité et les performances de détection, la spectroscopie d'absorption par diode laser accordable (Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy, TDLAS) utilise des sources laser dont la longueur d'onde peut être finement

ACCOMPAGNER LES STARTS-UP QUI INNOVENT

KAPAH DÉVELOPPEMENT DE GÉNÉRATEURS ET DE MODULATEURS D'ONDES THZ ULTRA-STABLES

- ▲ Télécommunications à haut débit (terrestres et non terrestres)
- ▲ Communications optiques (fibre optique et espace)
- ▲ Imagerie térahertz, radars ultraprécis et spectroscopie
- ▲ Applications quantiques



telliades next-gen IR viewers

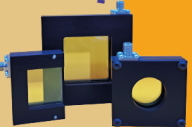
BEAMVIEWER IR DE DERNIÈRE GÉNÉRATION

- ▲ Alignement, maintenance, sécurité pour applications lasers



MODULATEURS DE LUMIÈRE HOASYS ET COMPOSANTS À CRISTAUX LIQUIDES

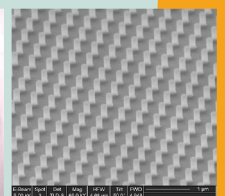
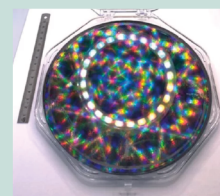
- ▲ Détection passive d'onde acoustique



SOLNIL nanosperm your world

REVÊTEMENTS NANOSTRUCTURÉS

- ▲ Métasurface, traitement AR très haute tenue au flux



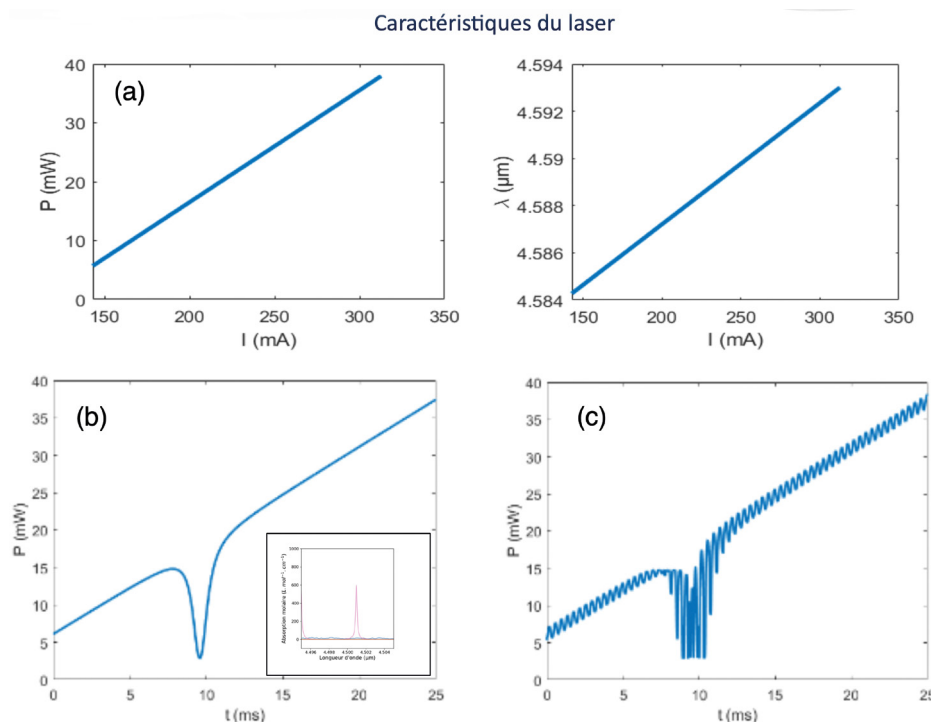


Figure 2. (a) Exemples de caractéristiques d'un laser QCL dans le Moyen infrarouge, (b) exemple de résultat par spectroscopie par diode laser accordable, insert : spectre d'absorption du CO autour de 4,5 μm , (c) exemple de résultat par spectroscopie par modulation de longueur d'onde.

ajustée (figure 2a) en jouant sur le courant pour sonder des raies d'absorption spécifiques des molécules à détecter (Figure 2b et insert). Cette approche offre une excellente résolution spectrale et permet des mesures rapides et ciblées. Toutefois, elle est contrainte par la plage d'accordabilité des lasers disponibles, ainsi que par leur coût et leur sensibilité aux dérives thermiques et instabilités du laser.

Enfin, la spectroscopie par modulation de longueur d'onde (Wavelength Modulation Spectroscopy, WMS) introduit une modulation périodique de la longueur d'onde autour d'une raie d'absorption, combinée à une détection synchrone permettant la détection du signal à des harmoniques spécifiques (1f, 2f). Cette technique permet de s'affranchir en grande partie du bruit basse fréquence et d'atteindre des limites de détection nettement plus faibles (Figure 2c). En contrepartie, elle nécessite un traitement du signal plus élaboré ainsi qu'une calibration précise pour relier les signaux

mesurés aux concentrations analytiques. Cette méthode permet ainsi d'obtenir des LoD plus faibles et une bonne robustesse vis à vis des fluctuations de puissance.

Le choix de la technique dépend du compromis recherché entre simplicité expérimentale, sensibilité et sélectivité, en fonction des contraintes applicatives, des performances visées et du coût associé.

DIFFÉRENTES STRUCTURE DE TRANSDUCTION EN PHOTONIQUE INTÉGRÉE

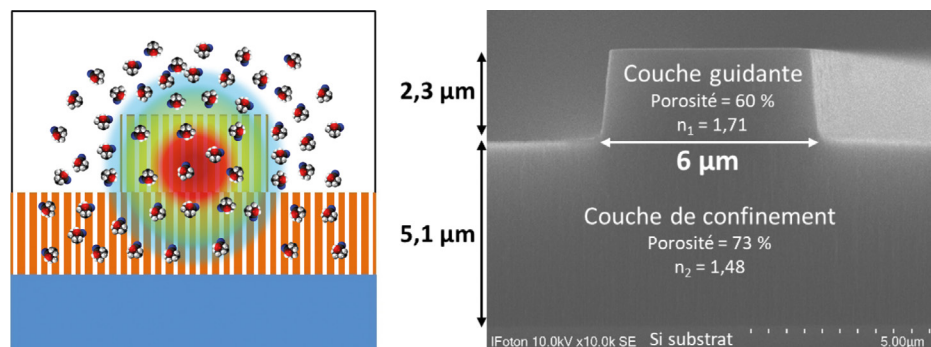
Une façon de diminuer la limite de détection est d'augmenter le facteur de confinement externe en jouant sur l'architecture des guides d'onde intégrés comme transducteur optique.

Transduction par onde évanescente

L'un des mécanismes de transduction exploités dans les capteurs en optique intégrée repose sur l'interaction par onde évanescente comme illustrée sur la figure 1. Une fraction du champ électromagnétique associée à un mode optique confiné dans un guide d'onde s'étend au-delà de l'interface couche guidante / superstrat et interagit ainsi avec les molécules présentes dans le superstrat. Lorsque la longueur d'onde du mode optique propagé dans le guide d'onde correspond à une raie d'absorption des espèces présentes dans le superstrat, la lumière sera absorbée de façon plus ou moins importante en fonction de la concentration des molécules présentes. La longueur d'onde permet donc de sélectionner l'analyte à détecter et la puissance collectée permet d'en déduire la concentration de ces molécules.

Dans le but d'augmenter la sensibilité du capteur développé, plusieurs études cherchent à optimiser le facteur de confinement externe du champ évanescent en réduisant les dimensions du guide d'onde au niveau de la zone de transduction pour

Figure 3. Schéma d'un guide d'onde en matériaux poreux avec présence de molécules absorbantes dans le superstrat mais également infiltrées dans la couche guidante et la couche de confinement, b) image obtenue par microscopie électronique à balayage d'un guide d'onde en silicium poreux [1, 3].



augmenter la fraction de champ évanescent ou en fabriquant des structures guidantes suspendues [1].

Transduction par détection de volume

L'interaction de volume est un autre schéma d'interaction entre le mode optique et l'analyte. Contrairement à l'interaction avec le champ évanescent qui intervient uniquement au niveau de la surface, l'interaction de volume est beaucoup plus importante car la fraction du mode optique localisée dans les couches guidante et de confinement interagit également avec les molécules à détecter. Ce schéma d'interaction peut prendre différentes formes soit en utilisant des guides présentant une structuration sub-longueur d'onde suspendus ou non [1, 3] ou en utilisant des guides d'onde slot permettant une interaction onde-matière plus importante.

Une autre architecture de guide d'onde pour optimiser la sensibilité de la détection consiste à fabriquer des structures guidantes à partir de matériaux poreux [1, 3] comme en silicium poreux. L'analyte pénètre alors *via* les pores sur une partie du volume des guides d'onde qui dépend de la porosité du matériau comme représenté sur la

figure 3. L'interaction lumière-analyte engendrée est ainsi fortement augmentée.

Principaux résultats de limite de détection dans le moyen infrarouge en optique intégrée

La performance d'un capteur optique est généralement évaluée à partir de sa limite de détection (LoD), définie comme la plus faible concentration d'analyte détectable. Celle-ci correspond à un signal dont l'amplitude est au moins 3,3 fois supérieure à l'écart-type du bruit mesuré en l'absence d'analyte [1] :

$$LoD = 3,3 \frac{\sigma}{S}$$

où σ représente l'écart-type du bruit du système de mesure et S la sensibilité, définie comme la variation de la puissance optique transmise en fonction de la variation de la concentration de l'analyte, comme indiqué précédemment.

La Figure 4 présente une synthèse non exhaustive des principaux résultats concernant la détection moyen infrarouge de molécules, tant en phase gazeuse que liquide, réalisées à l'aide de plateformes intégrées réalisées/fabriquées avec des matériaux transparents dans cette gamme de longueur d'onde.

Dans la majorité des démonstrations, les dimensions géométriques des structures permettent une propagation monomode et sont optimisées afin de maximiser le facteur de confinement externe. Ces capteurs exploitent la détection par onde évanescente avec des guides d'onde tels que des guides rubans ou par détection de volume en utilisant des guides d'onde tels que les slots. La majorité des plateformes sont utilisées pour des transductions à des longueurs d'onde inférieures à 7 μm . Seules quelques plateformes, notamment celles à base de Ge, de SiGe et de verres de Chalcogénures ont pu être utilisées au-delà de cette longueur d'onde grâce à leur large gamme de transparence. Les preuves de concept incluent la détection de gaz tels que CO_2 , CH_4 ou SF_6 , ainsi que de liquides comme l'acétonitrile ou l'isopropanol, y compris dans des mélanges complexes, ou encore de polluants émergents de type BTEX (benzène, toluène, xylène).

Certaines études démontrent la capacité des transducteurs à détecter des concentrations à l'état de traces. Ces limites de détection dépendent également de la stabilité des sources laser, des détecteurs utilisés et des différentes techniques de mesures ●●●



OPTRONIQUE

Obturbateur NUC rotatif RS08B

Tourelle gyroscopique stabilisée par motorisation piézoélectrique



INFRAROUGE

Mesure laser

Filtres optiques

Sphères intégrantes de puissance Laser

Sécurité Laser

Lasers Nd:YAG

Photodiodes

Visitez Pro-lite.fr



PRO-LITE
TECHNOLOGY

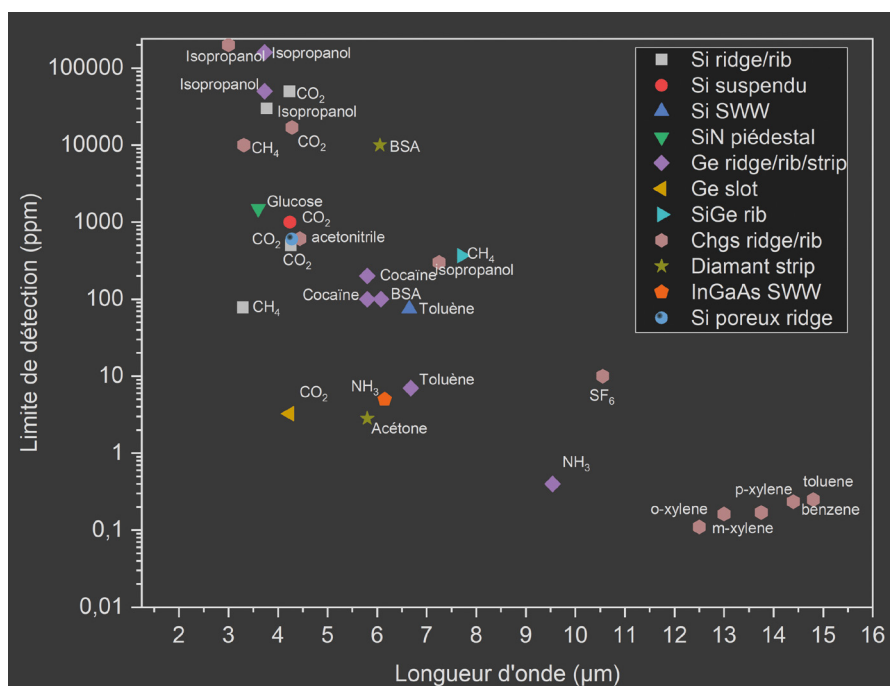


Figure 4. Résumé non exhaustif des LoD selon les matériaux et de leurs structures en optique intégrée [1, 4].

comme précisé précédemment. Bien que ces méthodes puissent être améliorées par l'utilisation de techniques telles que la spectroscopie par modulation de longueur d'onde (WMS) pour accroître la sensibilité, les limites de détection obtenues expérimentalement démontrent d'ores et déjà le fort potentiel des dispositifs photoniques intégrés pour de nombreuses applications *in situ*.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

La photonique intégrée dans le moyen infrarouge constitue aujourd'hui une voie particulièrement prometteuse pour le développement de systèmes de spectroscopie infrarouge compacts, sensibles et sélectifs. En tirant profit des bandes d'absorption fondamentales des molécules, cette approche permet une détection spécifique et quantitative de nombreuses espèces chimiques, ouvrant des perspectives majeures dans des domaines tels que l'environnement, la santé, le contrôle industriel et la défense.

L'exploitation de l'interaction par onde évanescente ou en volume pour la transduction au sein de circuit photoniques intégrés offre un levier intéressant pour miniaturiser les dispositifs tout en améliorant leurs performances.

L'une des perspectives réside dans la réalisation de spectromètres entièrement intégrés dans le moyen infrarouge, combinant sur une même plateforme les sources de lumière, les structures de guidage et de transduction ainsi que les

détecteurs. Différentes technologies de sources sont envisagées, telles que les lasers à cascade quantique (QCL), les sources supercontinuum ou encore les peignes de fréquences optiques, chacune présentant des avantages spécifiques en termes de largeur spectrale, de cohérence et de puissance. Leur intégration avec des détecteurs adaptés (par exemple à base de matériaux III-V ou de technologies compatibles CMOS) constitue une étape déterminante vers des systèmes autonomes et performants. Toutefois, plusieurs verrous scientifiques et technologiques subsistent. Ils concernent notamment la gestion des pertes optiques de ces plateformes dans le moyen infrarouge et la compatibilité des matériaux pour une intégration hétérogène des différentes fonctions (sources, guides, détecteurs). À cela s'ajoutent des défis liés à la dissipation thermique, à la stabilité des sources, ainsi qu'à l'optimisation du couplage optique entre les différents composants.

En dépit de ces défis, les avancées récentes en photonique intégrée et en ingénierie des matériaux laissent entrevoir la possibilité de spectromètres miniaturisés, robustes et à faible coût. À terme, ces dispositifs pourraient révolutionner l'accès à la spectroscopie infrarouge en la rendant portable et déployable à grande échelle, ouvrant ainsi la voie à de nouvelles applications en analyse *in situ* et en temps réel. ●

RÉFÉRENCES

- [1] Sofiane Meziani, « Développement de capteurs spectroscopiques en photonique intégrée dans le moyen infrarouge », thèse, Université de Rennes, (2024), <https://theses.fr/2024URENS027>
- [2] Aldo Gutierrez-Arroyo *et al.*, *Sensors and Actuators B: Chemical* **242**, 842 (2017), <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.09.174>
- [3] Rami Zegadi *et al.*, *J. Opt.* **23**, 035102 (2021), <https://doi.org/10.1088/2040-8986/abdf69>
- [4] Sofiane Meziani *et al.*, *Opt. Express* **33**, 17002 (2025), <https://doi.org/10.1364/OE.553730>