
Série 6
27 Mars 2018
Corps noir

Ex 1 : Densité d'états quantique et classique 1D, 2D et 3D d'un milieu uniforme

- a) Déterminer la relation de dispersion entre la fréquence angulaire $\omega = E/\hbar$ et le vecteur d'onde k pour un électron libre d'énergie E , de masse m dans un milieu uniforme. On notera V le potentiel uniforme.

On considère pour la suite de l'exercice que $V=0$.

- b) Même question que a) pour une onde électromagnétique.
- c) Donner la définition de la densité d'état $\rho_0(\nu)$.
- d) En utilisant l'approche développée dans le cours, déterminer la densité d'état électronique pour un système de dimension 3, 2 et 1.
- e) Même question que d) pour le cas d'une onde électromagnétique.
- f) Tracer les résultats obtenus aux questions d) et e).

On va reprendre les calculs précédents avec une approche plus générale et plus formelle.

- g) Montrer que la densité d'état peut s'écrire de manière générale

$$\rho_0(\omega) = \frac{dk^2(\omega)}{d\omega} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^2} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$
 avec en coordonnées cartésiennes

$$d\vec{k}' = dk_x' \text{ en 1D, } d\vec{k}' = dk_x' dk_y' \text{ en 2D et } d\vec{k}' = dk_x' dk_y' dk_z' \text{ en 3D}$$

- h) Calculer $\frac{dk^2(\omega)}{d\omega}$ pour l'électron et pour l'onde électromagnétique.

- i) Déterminer la densité d'état électronique. On rappelle que $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta[x-a]dx = f(a)$.

- j) Même question que i) pour une onde électromagnétique.

Correction

Ex 1 : Densité d'états quantique et classique 1D, 2D et 3D d'un milieu uniforme

- a) Pour un l'électron on peut relier l'énergie E au vecteur d'onde par:

$$E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V$$

On en déduit la relation de dispersion $\frac{2m(\hbar\omega - V)}{\hbar^2} = k^2$ qui s'écrit encore

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 + \frac{V}{\hbar}$$

- b) Pour l'onde électromagnétique on a $\omega = \frac{c}{n} \|\vec{k}\|$ avec n l'indice du milieu et c la vitesse de la lumière dans le vide. Pour s'affranchir de la valeur absolue on peut réécrire: $\omega^2 = \left(\frac{c}{n}\right)^2 k^2$
- c) La densité d'état $\rho_0(\nu)$ est le nombre de modes par unité de fréquence et par unité de volume. Pour la calculer il suffit de compter tous les états propres dans le milieu uniforme.
- d) 3D signifie ici que la particule est libre de se propager dans les 3 directions de l'espace.

2D signifie ici que la particule est libre de se propager dans seulement 2 directions de l'espace: il y a 2 degrés de liberté, x et y (par exemple) dans l'espace réel, et donc k_x et k_y dans l'espace réciproque (encore appelé l'espace des k). Cela correspond par exemple à un puits quantique pour l'électron (il peut se propager dans le plan du puits) ou à une cavité Fabry-Perot dans le cas du photon.

1D signifie ici que la particule est libre de se propager dans seulement 1 directions de l'espace: il y a 1 seul degré de liberté. Cela correspond par exemple à un fil quantique pour l'électron (il peut se propager le long du fil) ou à une fibre optique dans le cas du photon.

0D signifie ici que la particule ne se propage pas: elle est confinée dans les trois directions de l'espace. Cela correspond par exemple à une boîte quantique pour l'électron ou à une micro cavité sphérique dans le cas du photon.

Cas 3D: soit un cube de dimensions L_x, L_y, L_z (très grandes). Les fréquences spatiales de modes sont $k_i = \frac{n_i \pi}{L_i}$, $n_i = 1, 2, \dots$

un état occupe un volume $\frac{\pi^3}{L_x L_y L_z}$ dans l'espace réciproque.

Quand on passe de k à $k+dk$ le volume de l'espace réciproque s'accroît de $dV = d\left(\frac{4}{3}\pi k^3\right) = 4\pi k^2 dk$.

On ne prend en compte que les valeurs de k qui sont positives. De ce fait, le volume de la sphère est divisée par 8, tout comme le volume dV , ce qui donne:

$$dV = \frac{\pi}{2} k^2 dk$$

Le nombre d'états permis par unité de volume dans l'espace réel est donc:

$$\frac{dn}{L_x L_y L_z} = 2 \frac{\frac{\pi}{2} k^2 dk}{\frac{\pi^3}{L_x L_y L_z}} = \frac{k^2}{\pi^2} dk$$

Le facteur 2 vient du fait qu'il faut prendre en compte les deux états de spin possibles pour un électron.

comme $\frac{2m(\hbar\omega - V)}{\hbar^2} = k^2$ on en déduit :

$$\rho_{3D}^\omega(\omega) = \sqrt{2} \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\omega}$$

Cas 2D:

$$\frac{dn}{L_x L_y} = 2 \frac{\frac{\pi}{2} k dk}{\frac{\pi^2}{L_x L_y}} = \frac{k}{\pi} dk \text{ et donc:}$$

$$\rho_{2D}^\omega(\omega) = \frac{m}{\pi \hbar}$$

Cas 1D:

$$\frac{dn}{L_x} = \frac{1}{\pi} dk \text{ et donc:}$$

$$\rho_{1D}^\omega(\omega) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\omega}}$$

e) La seule chose qui change est la relation de dispersion $\omega^2 = \left(\frac{c}{n}\right)^2 k^2$. On obtient (en prenant en compte les deux polarisations de la lumière):

$$\rho_{3D}^v(\nu) = \frac{8\pi n^3 \nu^2}{c^3},$$

$$\rho_{2D}^v(\nu) = \frac{4\pi n^2 \nu}{c^2}$$

$$\rho_{1D}^{\nu}(\nu) = \frac{4n}{c}$$

$$\rho_{0D}^{\nu}(\nu) = \delta(\nu)$$

Remarque importante: on a utilisé les notations $\rho^{\nu}(\nu)$ et $\rho^{\omega}(\omega)$ pour bien faire la distinction entre un nombre d'états N par unité de fréquence et un nombre d'états N par unité de fréquence angulaire. En effet $dN = \rho^{\nu}(\nu)d\nu = \rho^{\omega}(\omega)d\omega$ et comme $d\nu = d\omega/(2\pi)$ on a $\rho^{\nu}(\nu) = 2\pi \times \rho^{\omega}(\omega)$.

- f) Quand il y a plusieurs niveaux confinés il faut considérer la somme sur tous les niveaux. Par exemple dans le cas de l'électrons 1D on obtient:

$$\rho_{1D}^{\omega}(\omega) = \sum_i \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\omega - \omega_i}} \text{ pour } \omega > \omega_i$$

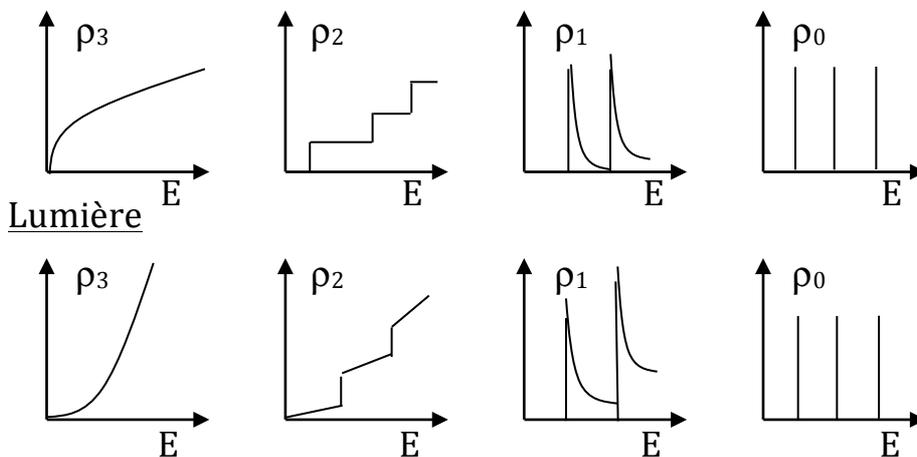
avec $\hbar\omega_i$ les énergies confinées dans le fil quantique.

et dans le cas d'un champ électromagnétique 1D:

$$\rho_{1D}^{\nu}(\nu) = \sum_i \frac{4n\nu}{c\sqrt{\nu^2 - \nu_i^2}}, \nu > \nu_i \text{ avec } \nu_i \text{ les fréquences de coupure du guide d'onde.}$$

Les courbes sont alors:

Electron



- g) On a par définition $\rho_0^{\omega}(\omega) = \frac{1}{L^d} \frac{dN(\omega)}{d\omega}$ avec $N(\omega)$ le nombre de modes à la fréquence ω .

Par ailleurs $dN(k) = \rho_0^k(k)dk = \rho_0^{k^2}(k^2)dk^2$ avec $N(k)$ le nombre de modes à la fréquence k .

$$\rho_0^{k^2}(k^2) = \frac{\int d\vec{k}'}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$

En écrivant $dN(\omega) = dN(k)$ on obtient:

$$\rho_0^\omega(\omega) = \frac{dk^2(\omega)}{d\omega} \frac{\int d\vec{k}'}{(2\pi)^d} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$

h) Pour l'onde associée à l'électron: $\frac{dk^2(\omega)}{d\omega} = \frac{2m}{\hbar}$

Pour l'onde électromagnétique: $\frac{dk^2(\omega)}{d\omega} = \frac{2\omega}{(c/n)^2}$

i) Il faut évaluer $\frac{\int d\vec{k}'}{(2\pi)^d} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$

En 1D on obtient:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk'}{(2\pi)} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = 2 \int_0^{+\infty} \frac{dk'^2}{(2\pi)} \frac{dk'}{dk'^2} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \int_0^{+\infty} \frac{dk'^2}{(2\pi)} \frac{1}{k'} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$

en utilisant $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta[x - a] dx = f(a)$:

$$\int_0^{+\infty} \frac{dk'^2}{(2\pi)} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \frac{1}{2\pi k(\omega)}$$

En 2D on obtient en utilisant le passage en coordonnées cylindriques:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x' dk_y'}{(2\pi)^2} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = 2\pi \int_0^{+\infty} \frac{k' dk'}{(2\pi)^2} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \int_0^{+\infty} \frac{dk'^2}{(4\pi)} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$

en utilisant $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta[x - a] dx = f(a)$:

$$\int_0^{+\infty} \frac{dk'^2}{(4\pi)} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \frac{1}{4\pi}$$

En 3D on obtient en utilisant le passage en coordonnées sphériques:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x' dk_y' dk_z'}{(2\pi)^3} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \int_0^{+\infty} \frac{2\pi k' dk'}{(2\pi)^3} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$$

en utilisant $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta[x - a] dx = f(a)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x' dk_y' dk_z'}{(2\pi)^3} \delta[k^2(\omega) - k'^2] = \frac{k(\omega)}{4\pi^2}$$

En utilisant la relation de dispersion $\frac{2m(\hbar\omega - V)}{\hbar^2} = k^2$ et en fixant le potentiel V à 0, on obtient:

$$\rho_0^\omega(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\omega} & \text{en 3D} \\ \frac{m}{2\pi\hbar} & \text{en 2D} \\ \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\omega}} & \text{en 1D} \end{cases}$$

Ces densités d'états pour les électrons sont à multiplier par 2 pour prendre en compte les deux spins autorisés pour chaque niveau électroniques

Cela donne bien au final:

$$\rho_0^\omega(\omega) = \begin{cases} \sqrt{2} \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\omega} & \text{en 3D} \\ \frac{m}{\pi\hbar} & \text{en 2D} \\ \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\omega}} & \text{en 1D} \end{cases}$$

j) On utilise les résultats de la question précédente pour le calcul de

$\frac{\int d\vec{k}'}{(2\pi)^d} \delta[k^2(\omega) - k'^2]$ ainsi que ceux de la question e) pour une onde électromagnétique. On obtient avec la relation de dispersion adéquate:

$$\rho_0^\omega(\omega) = \begin{cases} \frac{\omega^2}{2\pi^2(c/n)^3} & 3D \\ \frac{\omega}{2\pi(c/n)^2} & 2D \\ \frac{1}{\pi(c/n)} & 1D \end{cases}$$

Remarque: ici on n'a considéré qu'une seule polarisation, et par ailleurs $\rho^v(v) = 2\pi \times \rho^\omega(\omega)$ (c.f. $dv = d\omega/(2\pi)$ et $\rho^v(v)dv = \rho^\omega(\omega)d\omega$)