

SESSION 2011

AGRÉGATION
CONCOURS EXTERNE

Section : SCIENCES PHYSIQUES
Option A : PHYSIQUE

PROBLÈME DE PHYSIQUE

Durée : 6 heures

Calculatrice électronique de poche - y compris calculatrice programmable, alphanumérique ou à écran graphique – à fonctionnement autonome, non imprimante, autorisée conformément à la circulaire n° 99-186 du 16 novembre 1999.

L'usage de tout ouvrage de référence, de tout dictionnaire et de tout autre matériel électronique est rigoureusement interdit.

Dans le cas où un(e) candidat(e) repère ce qui lui semble être une erreur d'énoncé, il (elle) le signale très lisiblement sur sa copie, propose la correction et poursuit l'épreuve en conséquence.

De même, si cela vous conduit à formuler une ou plusieurs hypothèses, il vous est demandé de la (ou les) mentionner explicitement.

NB : *Hormis l'en-tête détachable, la copie que vous rendrez ne devra, conformément au principe d'anonymat, comporter aucun signe distinctif, tel que nom, signature, origine, etc. Si le travail qui vous est demandé comporte notamment la rédaction d'un projet ou d'une note, vous devrez impérativement vous abstenir de signer ou de l'identifier.*

Tournez la page S.V.P.

Quelques aspects de la nanophotonique

Le problème aborde plusieurs aspects de l'optique à des échelles inférieures à la longueur d'onde. Les deux premières parties sont largement indépendantes. Elles traitent respectivement des propriétés optiques des métaux et des plasmons dans un cadre classique. La troisième partie est totalement indépendante et introduit les notions de base de champ proche optique afin de discuter des fondements de la notion de résolution en optique. La quatrième partie prolonge les deux premières parties en abordant les propriétés optiques des nanoparticules métalliques. La cinquième partie porte sur le rayonnement thermique dans le vide (partie totalement indépendante) puis sur le rayonnement thermique au voisinage d'une nanoparticule en utilisant les résultats de la quatrième partie. Enfin, la sixième partie, totalement indépendante, revient sur les propriétés optiques des métaux : partant d'un cadre quantique, on établit l'approximation semiclassique qui permet de justifier l'utilisation de la mécanique classique dans la première partie.

Quelques données

Masse de l'électron : $m = 9,10 \times 10^{-31}$ kg

Charge de l'électron : $-e = -1,60 \times 10^{-19}$ C

Constante de Planck : $h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s, $\hbar = h/2\pi$

Constante de Boltzmann : $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J.K⁻¹

Vitesse de la lumière dans le vide : $c = 3,00 \times 10^8$ m.s⁻¹

Perméabilité magnétique du vide : $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H.m⁻¹

Propriétés de l'or :

Vitesse de Fermi de l'or : $v_F = 1,4 \times 10^6$ m.s⁻¹

Temps de relaxation de l'or à température ambiante et fréquence nulle : $\tau = 3 \times 10^{-14}$ s

Nombre d'électrons par unité de volume dans l'or : $n = 5,9 \times 10^{22}$ cm⁻³

Propriétés du carbure de silicium SiC :

Permittivité diélectrique relative du SiC (modèle de Lorentz) :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2 - i\gamma\omega},$$

avec $\varepsilon_\infty = 6,8$, $\omega_L = 959$ cm⁻¹, $\omega_T = 779$ cm⁻¹, $\gamma = 11,7$ cm⁻¹. Les pulsations sont exprimées en cm⁻¹, c'est-à-dire sous forme de nombres d'onde $\omega/2\pi c$.

Propriétés thermiques de l'eau à 288 K

Masse volumique $\rho = 1,00 \times 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$

Chaleur massique $c_p = 4,18 \times 10^3 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$

Conductivité thermique $k_{\text{eau}} = 0,597 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

Diffusivité thermique $D = 1,43 \times 10^{-7} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$

Notations

Le produit vectoriel sera noté \times .

Les parties réelle et imaginaire sont notées $\text{Re}(a + ib) = a$; $\text{Im}(a + ib) = b$.

Formulaire

Expression du gradient en coordonnées sphériques :

$$\vec{\text{grad}}(\Psi) = \frac{\partial \Psi}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \vec{e}_\phi$$

Expression du double produit vectoriel :

$$\vec{A} \times [\vec{B} \times \vec{C}] = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$$

1 Propriétés optiques des métaux. Modèle de Drude

L'objet de cette partie est d'étudier les propriétés optiques des métaux. On se propose de retrouver de façon élémentaire l'expression de Drude de la permittivité diélectrique d'un métal. Dans la dernière partie du problème, on part d'une description quantique et on introduit le modèle semi-classique des électrons. Ceci permet de justifier l'approche classique adoptée ici.

1.1 Modèle de Drude de la permittivité diélectrique

On cherche à modéliser les propriétés optiques des métaux en utilisant la physique classique. Plus précisément, on cherche à établir un modèle microscopique des propriétés optiques du métal. On note $\vec{r}(t)$ le déplacement d'un électron induit par le champ électrique d'amplitude complexe $\vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$. On néglige la force magnétique exercée sur l'électron. On s'intéresse à modéliser la permittivité diélectrique du métal. On ne considère que la contribution des électrons libres à la permittivité dans ce qui suit.

1.1.1 Ecrire l'expression du vecteur polarisation \vec{P} en fonction du nombre n d'électrons par unité de volume, de la charge $-e$ et du déplacement $\vec{r}(t)$ induit par le champ électrique.

1.1.2 Calculer l'amplitude complexe \vec{r}_0 du déplacement $\vec{r}(t) = \text{Re}[\vec{r}_0 \exp(-i\omega t)]$. On utilisera le principe fondamental de la dynamique appliqué à un électron. On introduira une force visqueuse du type $-\gamma m d\vec{r}/dt$ qui permet de modéliser les mécanismes dissipatifs.

1.1.3 On rappelle la définition du vecteur $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ et de la permittivité diélectrique relative ε_m , $\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_m \vec{E}$. Montrer que la permittivité diélectrique relative s'écrit sous la forme :

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad (1)$$

où $\omega_p^2 = ne^2/m\varepsilon_0$.

1.1.4 Calculer numériquement la valeur de la pulsation plasma ω_p pour l'or. Calculer la longueur d'onde λ_p correspondante.

1.2 Conductivité électrique

1.2.1 En reprenant la même démarche, montrer que la conductivité électrique σ s'écrit sous la forme :

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau},$$

où $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ et $\tau = 1/\gamma$.

1.2.2 Pour caractériser la contribution des électrons libres aux propriétés optiques, faut-il connaître la conductivité et la permittivité diélectrique ou bien une seule de ces deux grandeurs ?

2 Plasmon de volume et plasmon de surface

Les plasmons sont des modes collectifs d'excitation des électrons dans les métaux. La première question porte sur les deux types de solution obtenues dans les milieux matériels : les ondes transverses et les ondes longitudinales. La seconde question conduit à une première approche du plasmon en tant que solution longitudinale des équations de Maxwell. La troisième question introduit le plasmon comme une onde acoustique se propageant dans le gaz d'électrons libres. Enfin, la quatrième question introduit l'étude de modes confinés à l'interface métal-vide : les plasmons de surface.

2.1 Propagation dans un milieu matériel

Contrairement au cas du vide, il peut exister dans les milieux matériels des solutions longitudinales aux équations de Maxwell. Cette première partie établit les relations de dispersion des solutions transverses et longitudinales.

2.1.1 On peut représenter les champs électromagnétiques sous la forme d'une superposition d'ondes planes :

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \int \frac{dk_x}{2\pi} \int \frac{dk_y}{2\pi} \int \frac{dk_z}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \vec{E}(\vec{k}, \omega) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \int \frac{dk_x}{2\pi} \int \frac{dk_y}{2\pi} \int \frac{dk_z}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \vec{B}(\vec{k}, \omega) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)].\end{aligned}$$

On définit les composantes longitudinales et transverses par $\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}_\perp(\vec{k}, \omega) + \vec{E}_\parallel(\vec{k}, \omega)$ avec :

$$\begin{aligned}\vec{E}_\parallel(\vec{k}, \omega) &= \frac{(\vec{E}(\vec{k}, \omega) \cdot \vec{k})\vec{k}}{k^2}, \\ \vec{E}_\perp(\vec{k}, \omega) &= \vec{E}(\vec{k}, \omega) - \frac{(\vec{E}(\vec{k}, \omega) \cdot \vec{k})\vec{k}}{k^2}.\end{aligned}$$

A ces deux champs correspondent deux champs dans l'espace direct de sorte que $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_\perp(\vec{r}, t) + \vec{E}_\parallel(\vec{r}, t)$. Montrer que :

$$\text{div } \vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = 0 ; \quad \vec{\text{rot}} \vec{E}_\parallel(\vec{r}, t) = \vec{0}.$$

2.1.2 On considère un métal caractérisé par une permittivité diélectrique relative complexe $\varepsilon_m(\omega)$ (on note ε_0 la permittivité diélectrique du vide) et par une perméabilité magnétique égale à celle du vide ($\mu = \mu_0$). Expliquer pourquoi l'équation de Maxwell-Ampère s'écrit sous la forme :

$$\vec{\text{rot}} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t},$$

sans qu'apparaisse la contribution d'une densité de courant \vec{j} .

2.1.3 En utilisant les équations de Maxwell reliant \vec{E} et \vec{B} d'une part, \vec{H} et \vec{D} d'autre part, pour une onde plane de la forme $\vec{E}(\vec{k}, \omega) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$, expliciter les relations entre $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$ et $\vec{B}(\vec{k}, \omega)$.

2.1.4 Eliminer \vec{B} et montrer que l'on obtient deux relations de dispersion différentes pour les composantes transverses $\vec{E}_\perp(\vec{k}, \omega)$ et longitudinales $\vec{E}_\parallel(\vec{k}, \omega)$ du champ électromagnétique.

2.1.5 A quelle condition existe-t-il une solution longitudinale ? Cette solution peut-elle exister dans le vide ?

2.2 Plasmon de volume

2.2.1 Dans le cas d'un modèle de Drude sans pertes (équation (1) avec $\gamma = 0$), quelle est la relation de dispersion de la solution longitudinale ? On appelle plasmon de volume cette solution.

2.2.2 En présence du plasmon de volume, calculer la densité volumique de charges en fonction de l'amplitude du champ \vec{E}_\parallel et du vecteur d'onde \vec{k} .

2.3 Modèle hydrodynamique des plasmons

On se propose dans cette partie de retrouver la relation de dispersion du plasmon de volume à l'aide d'un modèle hydrodynamique. On modélise le métal par un gaz d'électrons libres sans interactions, placé dans un milieu chargé positivement et uniformément avec une densité volumique de charge $n_0 e$. On introduit le champ de vitesse des électrons $\vec{v}(\vec{r}, t)$, le champ de pression $\Pi(\vec{r}, t)$, et le nombre d'électrons par unité de volume $n_e(\vec{r}, t)$.

2.3.1 Ecrire l'équation d'Euler pour le champ de vitesse des électrons. Justifier le fait de négliger la contribution du champ magnétique.

2.3.2 Ecrire l'équation de conservation de la masse et l'équation de Maxwell-Gauss qui relie le champ électrique à la densité de charge.

2.3.3 On cherche à établir une équation d'onde linéaire. Afin de linéariser l'équation d'Euler, on introduit la notation $n_e = n_0 + n_1(\vec{r}, t)$ où n_1 sera traitée comme une perturbation d'ordre 1. De la même façon, on note $\Pi(\vec{r}, t) = \Pi_0 + \Pi_1(\vec{r}, t)$. Montrer que la vitesse est un terme d'ordre 1 en n_1/n_0 .

2.3.4 Montrer que $n_1(\vec{r}, t)$ satisfait à une équation de propagation que l'on explicitera. On pourra utiliser la relation $\partial \Pi / \partial n_e = m v_F^2 / 3$, où v_F est la vitesse de Fermi.

2.3.5 En déduire la relation de dispersion de l'onde de densité de charges :

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{v_F^2}{3} k^2.$$

2.3.6 En vous appuyant sur les ordres de grandeur pour l'or, expliquer pourquoi il est possible de négliger la dépendance en k lorsque l'on travaille dans le visible.

2.3.7 En quoi l'onde obtenue s'apparente-t-elle à une onde acoustique ?

2.4 Plasmon de surface

On étudie maintenant une interface séparant un métal (milieu 2, $z < 0$) du vide (milieu 1, $z > 0$). On recherche l'existence d'une onde de surface, c'est-à-dire d'une onde d'amplitude décroissant exponentiellement de part et d'autre de l'interface.

2.4.1 Etablir l'équation de Helmholtz satisfaite par un champ électrique monochromatique oscillant à la pulsation ω dans le métal et dans le vide. On supposera ici que le métal est un milieu sans pertes décrit par une permittivité diélectrique relative ϵ_m réelle négative. De plus, on recherche une onde transverse ($\text{div} \vec{E} = 0$).

2.4.2 Rappeler les relations de continuité des champs à l'interface.

2.4.3 On cherche une solution transverse ($\text{div} \vec{E} = 0$) de la forme :

$$\begin{aligned} z > 0 & \quad \vec{E}_1 \exp[i(\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel} + \gamma_1 z)] \\ z < 0 & \quad \vec{E}_2 \exp[i(\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel} - \gamma_2 z)], \end{aligned}$$

où $\vec{r}_{\parallel} = (x, y, 0)$ et $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$. Pourquoi \vec{k}_{\parallel} prend-il la même valeur dans les deux milieux ?

2.4.4 Déduire de l'équation d'Helmholtz les expressions de γ_1 et de γ_2 en fonction de \vec{k}_{\parallel} , ω , c et ϵ_m .

2.4.5 A quelle condition sur \vec{k}_{\parallel} la solution est-elle une onde de surface ?

2.4.6 Sans perte de généralité, on considère que l'onde se propage le long de l'axe Ox . On recherche une solution de polarisation transverse magnétique $TM(E_y = 0)$. Etablir la relation de dispersion sous la forme :

$$\epsilon_m \gamma_1 + \gamma_2 = 0.$$

2.4.7 En déduire la relation de dispersion reliant la pulsation ω à la composante \vec{k}_{\parallel} du plasmon de surface :

$$\vec{k}_{\parallel}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\epsilon_m}{\epsilon_m + 1}.$$

2.4.8 On considère un métal décrit par un modèle de Drude sans pertes. Tracer l'allure de la relation de dispersion $\omega(k_{\parallel})$. Pourquoi la branche d'énergie supérieure à ω_p n'est-elle pas un mode de surface ? Montrer que la relation de dispersion présente une asymptote pour une valeur de ω que l'on précisera. On tracera la droite $\omega = ck_{\parallel}$ appelée cône de lumière. Montrer que $k_{\parallel} > \omega/c$.

2.4.9 Montrer que les solutions ayant un vecteur d'onde $k_{\parallel} \gg \omega/c$ sont fortement confinées dans le vide ($z > 0$) au voisinage de l'interface sur une distance d que l'on précisera.

2.4.10 Expliquer pourquoi l'on ne peut pas exciter un plasmon de surface en éclairant l'interface plane avec une onde plane venant du milieu 1.

2.4.11 On modélise un atome par un dipôle oscillant à la pulsation ω dans le visible. Si l'atome est placé à quelques nanomètres de la surface, peut-il exciter un plasmon de surface ?

2.4.12 On appelle densité d'états électromagnétiques le nombre de modes caractérisés par \vec{k} et ω par unité de volume. En utilisant la relation de dispersion des plasmons de surface, expliquer qualitativement que la densité d'états électromagnétiques présente un pic à une fréquence que l'on précisera.

2.4.13 On modélise un atome par un système à deux niveaux d'énergies E_2 et $E_1 < E_2$ avec $\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1$. La règle d'or de Fermi permet de montrer que la durée de vie de l'atome dans son état excité est inversement proportionnelle à la densité d'états électromagnétiques à la fréquence ω_{12} . Que peut-on dire de la durée de vie d'un atome excité placé à quelques nanomètres de la surface ?

3 Limite de résolution et microscopie de champ proche

Alors que la communauté scientifique avait accepté depuis Rayleigh et Abbe l'idée que la demi-longueur d'onde est une limite fondamentale de résolution en imagerie optique, il a été montré en 1984 qu'il est possible de réaliser des images optiques d'objets plus petits qu'une demi-longueur d'onde et séparés d'une distance plus petite que la demi-longueur d'onde. L'objet de cette partie est de revisiter les fondements de la notion de résolution et d'introduire les bases de l'optique de champ proche.

3.1 Rayonnement en champ proche

On rappelle l'expression du champ électrique rayonné en un point \vec{r} par un dipôle monochromatique de pulsation ω de moment dipolaire d'amplitude complexe \vec{p} placé à l'origine :

$$\vec{E}(\vec{r}) \exp(-i\omega t) = \frac{k^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp(ikr)}{r} \left\{ [(\vec{u} \times \vec{p}) \times \vec{u}] + [3\vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{p}) - \vec{p}] \left[\frac{1}{k^2 r^2} - \frac{i}{kr} \right] \right\} \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

où $\vec{u} = \vec{r}/r$, $k = \omega/c$ et c est la vitesse de la lumière dans le vide. On note λ la longueur d'onde dans le vide.

3.1.1 Quelle est l'expression du champ électrostatique $\vec{E}(\vec{r})$ pour $\omega = 0$?

3.1.2 Montrer que, pour des distances inférieures à une longueur que l'on précisera, on trouve un champ dépendant du temps qui a la même structure spatiale que le champ électrostatique.

3.1.3 On rappelle l'expression du potentiel scalaire généré par une distribution de charges ρ :

$$\Phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dx' dy' dz',$$

où V représente le volume dans lequel se trouvent les charges. Rappeler l'expression du potentiel scalaire généré par une distribution statique de charges $\rho(\vec{r}')$. A la limite où c tend vers l'infini, comparer la solution retardée avec la solution électrostatique dans un domaine borné.

3.1.4 Expliciter l'amplitude complexe $\Phi(\vec{r})$ du potentiel $\Phi(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$ dans le cas d'une distribution de charges monochromatique d'amplitude $\rho(\vec{r}') \exp(-i\omega t)$ d'extension spatiale très petite devant λ . On ne s'intéresse ici qu'à un domaine proche des sources avec $|\vec{r}| \ll \lambda$. Montrer que les limites c infinie, fréquence nulle et courte distance coïncident.

On appellera dans ce qui suit "champ proche" la zone dans laquelle les termes en $1/r^3$ apparaissant dans l'équation (2) donnent la contribution dominante au champ électrique.

3.1.5 Quel est l'ordre de grandeur de l'extension spatiale de la zone de champ proche si l'on travaille dans le domaine visible ? dans le domaine des micro-ondes ? dans le domaine des grandes ondes (100 kHz) ?

3.2 Propagation dans le vide et super-résolution

Dans cette partie, nous allons étudier l'origine de la limite de résolution des instruments d'optique. En établissant une solution générale de l'équation de propagation des ondes, nous allons retrouver l'origine de cette limite. Ceci permettra d'analyser à quelles conditions il est possible de réaliser des images avec une résolution meilleure qu'une demi-longueur d'onde. Pour simplifier les notations, nous travaillerons avec une seule composante du champ électrique, ce qui permet de se ramener à un problème scalaire. On appelle $\Psi(x, y, z, t)$ l'amplitude réelle du champ.

3.2.1 Ecrire l'équation de propagation dans le vide satisfaite par le champ $\Psi(x, y, z, t)$. On note c la vitesse de propagation de l'onde dans le vide.

3.2.2 On introduit une représentation de Fourier du champ par rapport au temps :

$$\Psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, y, z, \omega) \exp(-i\omega t) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Bien que $\Psi(x, y, z, t)$ et $\Psi(x, y, z, \omega)$ soient deux fonctions différentes, transformées de Fourier l'une de l'autre, nous utiliserons le même symbole Ψ . C'est la notation de l'argument (t ou ω) qui permet de savoir de quelle fonction il s'agit. Montrer que $\Psi(x, y, z, \omega)$ vérifie l'équation :

$$\Delta \Psi(x, y, z, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \Psi(x, y, z, \omega) = 0,$$

appelée équation de Helmholtz.

3.2.3 On introduit maintenant la transformée de Fourier $\Psi(\alpha, \beta, z, \omega)$ par rapport à x, y et t :

$$\Psi(x, y, z, \omega) = \int \frac{d\alpha}{2\pi} \int \frac{d\beta}{2\pi} \Psi(\alpha, \beta, z, \omega) \exp[i(\alpha x + \beta y)].$$

Montrer qu'elle vérifie l'équation :

$$\frac{\partial^2 \Psi(\alpha, \beta, z, \omega)}{\partial z^2} + \gamma^2 \Psi(\alpha, \beta, z, \omega) = 0,$$

où $\gamma^2 = \omega^2/c^2 - \alpha^2 - \beta^2$.

3.2.4 Etablir l'expression de la solution générale $\Psi(\alpha, \beta, z, \omega)$.

3.2.5 On s'intéresse à un champ qui se propage dans le sens des z positifs. De plus, on suppose connu le champ dans le plan $z = 0$, noté $\Psi_0(x, y, \omega)$. En déduire la solution $\Psi(\alpha, \beta, z, \omega)$ qui satisfait à ces conditions aux limites en fonction de $\Psi_0(x, y, \omega)$.

3.2.6 En déduire l'expression du champ $\Psi(x, y, z, \omega)$ en tout point de l'espace $z > 0$:

$$\Psi(x, y, z, \omega) = \int \frac{d\alpha}{2\pi} \int \frac{d\beta}{2\pi} \Psi_0(\alpha, \beta, \omega) \exp[i(\alpha x + \beta y + \gamma z)],$$

avec $\text{Re}(\gamma) \geq 0$ et $\text{Im}(\gamma) \geq 0$.

3.2.7 On considère un réseau placé dans le plan $z = 0$, de taille infinie, éclairé par une onde plane monochromatique de pulsation ω en incidence normale. Le facteur de transmission du champ Ψ est de la forme :

$$t_{res}(x, y) = 1 + m \cos\left(\frac{2\pi x}{d}\right).$$

On considère deux réseaux ayant une période $d = \lambda/10$ pour l'un et $d = 1,5 \lambda$ pour l'autre. Montrer que l'onde diffractée est progressive dans un cas et évanescente dans l'autre.

3.2.8 En déduire que la propagation se comporte comme un filtre de fréquences spatiales. On introduira un vecteur d'onde de coupure.

3.2.9 En utilisant les propriétés de la transformée de Fourier, donner sans calcul la limite fondamentale de résolution spatiale de tout système d'imagerie travaillant en champ lointain avec un champ monochromatique de longueur d'onde λ .

3.2.10 Est-il intéressant de travailler dans un liquide d'indice $n > 1$ du point de vue de la résolution ?

3.2.11 Estimer la taille minimale d'un pixel sur un compact disk compte tenu des limites de résolution. Les premiers systèmes travaillaient avec une longueur d'onde de 780 nm. En déduire une estimation de la capacité maximale d'un compact disk assimilé à un disque de rayon 6 cm.

3.2.12 Quel gain peut-on espérer en utilisant une longueur d'onde de 405 nm ?

3.2.13 On considère maintenant le cas où l'onde plane monochromatique éclaire une ouverture carrée de côté $a \ll \lambda$ placée dans le plan $z = 0$. En déduire l'expression du champ en tout point $z > 0$ sous la forme d'une intégrale. Est-ce que toutes les fréquences spatiales peuvent se propager en champ lointain ?

3.2.14 Montrer que si l'on place un capteur très près de la surface de sorte que l'on puisse mesurer le champ à une distance z de l'objet étudié très inférieure à $\lambda/2\pi$, on peut détecter la contribution de fréquences spatiales plus élevées que $2\pi/\lambda$. Ecrire une expression approchée de γ pour $\alpha^2 + \beta^2 \gg \omega^2/c^2$, en déduire une fréquence spatiale de coupure que l'on précisera en fonction de z . Quelle est alors la limite de résolution dans le cas où $z \ll \lambda$?

3.2.15 L'auteur du premier article présentant une image avec une résolution meilleure que la demi-longueur d'onde a appelé son instrument "stéthoscope optique" en référence au stéthoscope des médecins. L'instrument consistait en une petite ouverture percée dans un plan métallique. Cette ouverture pouvait être déplacée parallèlement au plan à imager. En enregistrant l'intensité traversant l'ouverture en fonction de la position de l'ouverture, on peut ainsi former une image. Nous allons préciser ici l'analogie avec le stéthoscope :

- i) Expliquer pourquoi la modélisation précédente s'applique au cas d'une onde acoustique.
- ii) Quel est l'ordre de grandeur de la vitesse de propagation du son dans l'air, dans l'eau ?
- iii) Quel est l'ordre de grandeur de la longueur d'onde du son dans le corps humain ? On considère par exemple le son émis par un cœur à une fréquence de 1 battement par seconde.
- iv) D'après le critère de résolution de Rayleigh, peut-on localiser les sons émis par les cœurs d'un fœtus et de sa mère ? Expliquer pourquoi le médecin réussit à le faire.

4 Quelques propriétés optiques des nanoparticules

L'objet de cette partie est d'étudier la polarisabilité d'une nanoparticule et de mettre en évidence des résonances dues à l'excitation de plasmons.

4.1 Polarisation d'une nanoparticule

On éclaire une nanoparticule sphérique de rayon a inférieur à 30 nm. On utilise un champ électromagnétique dont la longueur d'onde est 633 nm.

4.1.1 Expliquer pourquoi on peut utiliser une approximation électrostatique pour étudier la réponse de la nanoparticule.

4.1.2 Afin de calculer le champ dans la nanoparticule, on se ramène à un problème électrostatique caractérisé par un potentiel scalaire noté $V(\vec{r})$. La nanoparticule est caractérisée par une permittivité diélectrique relative isotrope ϵ_m . La particule est dans un milieu hôte de permittivité diélectrique relative isotrope ϵ_h dans lequel se trouve un champ électrique uniforme \vec{E}_{ext} suivant l'axe Oz. Ecrire l'équation différentielle qui régit $V(\vec{r})$ ainsi que les conditions aux limites.

4.1.3 On travaille en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) où θ est l'angle formé entre l'axe Oz et le vecteur \vec{r} . On cherche la solution générale de l'équation différentielle qui régit $V(\vec{r})$ sous la forme :

$$\begin{aligned} r < a : \quad V_m &= C_m z = C_m r \cos \theta \\ r > a : \quad V_h &= -E_{ext} r \cos \theta + C_h \frac{\cos \theta}{r^2}. \end{aligned}$$

Montrer que :

$$C_h = a^3 \frac{\epsilon_m - \epsilon_h}{\epsilon_m + 2\epsilon_h} E_{ext}.$$

4.1.4 En déduire que le champ dans la particule \vec{E}_{int} vaut :

$$\vec{E}_{int} = \frac{3\epsilon_h}{\epsilon_m + 2\epsilon_h} \vec{E}_{ext}.$$

4.1.5 Le potentiel $C_h \cos \theta / r^2$ a la structure d'un potentiel dipolaire électrostatique :

$$\frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}.$$

En déduire que la polarisabilité α de la particule, définie par $\vec{p} = \alpha\epsilon_0 \vec{E}_{ext}$, s'écrit :

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon_m - \epsilon_h}{\epsilon_m + 2\epsilon_h}.$$

4.2 Résonance de plasmon de surface

4.2.1 On considère une particule métallique dans le vide et l'on modélise les propriétés optiques par un modèle de Drude décrit par l'équation (1) avec $\gamma = 0$. En négligeant l'effet des termes dissipatifs, montrer que le moment dipolaire de la particule diverge pour $\omega_0 = \omega_p/\sqrt{3}$.

4.2.2 On prend maintenant en compte la présence de pertes dans le modèle de la permittivité diélectrique avec $\gamma \ll \omega_p$. Montrer que le dénominateur de la polarisabilité s'annule pour une valeur complexe de la pulsation que l'on déterminera.

4.2.3 Tracer l'allure de $|\alpha|^2$ en fonction de ω au voisinage de ω_0 . On introduit la largeur totale à mi-hauteur (FWHM) $\Delta\omega$. En déduire le facteur de qualité $Q = \omega_p/(\sqrt{3}\Delta\omega)$ de la résonance en fonction de ω_p et γ .

4.2.4 Calculer le rapport des amplitudes du moment dipolaire à la résonance et à $\omega = 0$ en fonction du facteur de qualité de la résonance.

4.2.5 Montrer que l'expression générale de la moyenne temporelle de la puissance dissipée par unité de volume par le champ électrique \vec{E} dans un milieu matériel caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε_m se met sous la forme :

$$\frac{\omega\varepsilon_0\text{Im}(\varepsilon_m)}{2}|\vec{E}|^2,$$

où $\text{Im}(z)$ désigne la partie imaginaire de z .

4.2.6 Calculer la puissance moyenne temporelle absorbée P_{abs} par une nanoparticule éclairée par une onde plane électromagnétique monochromatique de pulsation ω dont l'amplitude est E_{inc} . On donnera le résultat en fonction de ω , a , ε_0 , ε_m et E_{inc} .

4.2.7 En déduire la section efficace d'absorption σ_{abs} de la nanoparticule. On rappelle que la section efficace d'absorption est égale au rapport de la puissance moyenne absorbée sur la valeur moyenne temporelle du vecteur de Poynting :

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{2P_{\text{abs}}}{\varepsilon_0 c |E_{\text{inc}}|^2}.$$

Quelle est la dimension d'une section efficace ?

4.2.8 On rappelle que la puissance moyenne rayonnée dans tout l'espace par un dipôle de moment dipolaire \vec{p} est donnée par :

$$P_{\text{ray}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\omega^4 |\vec{p}|^2}{3c^3}.$$

En déduire la puissance moyenne diffusée P_{diff} par la particule et la section efficace de diffusion :

$$\sigma_{\text{diff}} = \frac{2P_{\text{diff}}}{\varepsilon_0 c |E_{\text{inc}}|^2}.$$

4.2.9 Montrer que lorsque la taille de la particule tend vers zéro, la section efficace de diffusion devient négligeable devant la section efficace d'absorption. On envisage ci-dessous deux exemples d'application des effets de résonance des nanoparticules.

4.3 Application 1 : couleur des vitraux

4.3.1 Pour l'argent, la pulsation résonnante correspond à la longueur d'onde de 350 nm. La section efficace de diffusion est à peu près égale à la section efficace d'absorption pour des particules de rayon d'environ 50 nm. Certains vitraux de la Sainte Chapelle à Paris apparaissent rouge en transmission et en réflexion. Le vase de Lycurgue que l'on peut voir au British Museum apparaît rouge en transmission mais vert en réflexion. Dans les deux cas, l'effet est dû à des nanoparticules d'argent.

- i) Pourquoi le verre contenant des nanoparticules d'argent apparaît rouge par transmission ?
- ii) Expliquer les deux comportements différents et en déduire une information sur la taille des particules.
- iii) Pourquoi l'argent massif n'est-il pas coloré ?

4.4 Application 2 : thérapie du cancer

On envisage actuellement de soigner certains cancers à l'aide de nanoparticules d'or. Des nanoparticules d'or sont fonctionnalisées, c'est-à-dire que l'on greffe sur ces particules des molécules pouvant adhérer à l'or d'une part et pouvant se greffer sélectivement sur les cellules cancéreuses d'autre part. Le protocole consiste à ingérer par voie orale une solution de nanoparticules qui vont se fixer sélectivement sur les cellules cancéreuses. On peut alors éclairer depuis l'extérieur le patient avec du rayonnement situé dans le proche infrarouge qui est la bande spectrale de plus grande transparence des tissus vivants.

4.4.1 Quelle est l'énergie absorbée par une nanoparticule de section efficace σ_{abs} éclairée par un flux surfacique ϕ pendant une durée Δt ?

4.4.2 La puissance absorbée par la particule passe par conduction dans les tissus environnants. Du point de vue des propriétés thermiques, on assimile les tissus vivants à de l'eau. Combien de particules par unité de volume sont nécessaires pour élever la température de 10 K ? On donnera le résultat en fonction des propriétés thermiques de l'eau, σ_{abs} , ϕ et Δt .

4.4.3 Application numérique : $\Delta t = 200$ s, $\phi = 4$ W.cm⁻², $\sigma_{\text{abs}} = 4,00 \cdot 10^{-14}$ m².

4.4.4 En pratique, on éclaire le patient avec un faisceau de section d'environ 1 cm^2 . Les expériences montrent que seule la zone éclairée conduit à une destruction des cellules. Montrer par un calcul d'ordre de grandeur que la chaleur n'a pas le temps de diffuser en dehors de la zone éclairée pendant la durée d'éclairement. Les propriétés thermiques des tissus seront assimilées aux propriétés thermiques de l'eau en première approximation.

5 Rayonnement thermique en champ proche

Dans cette partie nous allons explorer un autre aspect des propriétés optiques à l'échelle nanométrique. Lorsque l'on étudie le rayonnement thermique émis par la matière en se plaçant au voisinage de la matière (en champ proche), le rôle des modes propres tels que les plasmons par exemple devient prépondérant. Afin d'en rendre compte, il est possible de décrire le *rayonnement thermique* avec une approche basée sur les équations de l'*électromagnétisme*. La première question de cette partie a pour objet de retrouver l'expression du rayonnement de corps noir avec la démarche traditionnelle dans le cadre de la physique statistique. La seconde question montre que l'on peut calculer le rayonnement thermique émis par une nanoparticule avec une approche de type rayonnement dipolaire. Ceci permet notamment d'avoir accès aux propriétés du rayonnement thermique en champ proche de la particule. Nous allons examiner ces effets dans le cas particulier du rayonnement d'une nanoparticule de carbure de silicium portée à température T .

5.1 Rayonnement thermique dans le vide

Le but de cette partie est de retrouver l'expression du spectre du rayonnement de corps noir. En d'autres termes, on cherche à calculer l'énergie par unité de volume du rayonnement dans le vide.

5.1.1 Rappeler l'expression U de l'énergie électrique et magnétique dans le vide par unité de volume.

5.1.2 On rappelle qu'un mode du champ électromagnétique de vecteur d'onde \vec{k} et de pulsation ω a un spectre d'énergie quantifié de la forme $u_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. On considère que ce mode est en équilibre thermodynamique avec un thermostat à température T avec lequel il peut échanger de l'énergie. Quel est l'ensemble représentatif adapté à la description statistique de ce système ? Quelle est la probabilité que le système soit dans un état caractérisé par le nombre quantique n ?

5.1.3 Calculer la fonction de partition Z correspondante.

5.1.4 En déduire l'énergie moyenne notée \bar{u} de ce mode.

5.1.5 En prenant en compte la polarisation du champ électromagnétique, indiquer quelle est la dégénérescence du mode caractérisé par \vec{k} et ω .

5.1.6 Afin de retrouver l'expression de la densité spectrale d'énergie par unité de volume du corps noir, on calcule maintenant le nombre de modes par unité de volume. On s'intéresse au champ à l'intérieur d'un volume cubique de côté L très grand devant la longueur d'onde. On utilise les conditions aux limites périodiques. On considère que le champ possède la même périodicité. Quelle est la conséquence sur \vec{k} de cette condition de périodicité ?

5.1.7 En déduire le nombre $g(\omega)d\omega$ de modes par unité de volume de pulsation comprise entre ω et $\omega + d\omega$.

5.1.8 Montrer que la densité spectrale d'énergie par unité de volume s'écrit :

$$\frac{d\bar{U}}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \right] \hbar\omega.$$

5.1.9 En déduire l'expression de $G_{E_x}(\omega)$, densité spectrale de puissance d'une composante du champ électrique $E_x(t)$, définie par :

$$\overline{E_x^2(t)} = \int_0^\infty G_{E_x}(\omega) d\omega.$$

5.2 Rayonnement thermique près d'une nanoparticule

L'objet de cette question est de réexaminer la question de l'énergie électromagnétique dans le vide lorsque l'on se place très près de la surface de la matière. Le champ électromagnétique à l'équilibre thermodynamique dépend alors de la nature du matériau considéré. Pour illustrer ceci, nous allons considérer un cas très simple : une particule sphérique de carbure de silicium (SiC) dans du vide. On se propose de calculer la densité d'énergie électrique au voisinage de la particule. Pour ce faire, nous allons utiliser une approche électromagnétique pour calculer le champ produit par la particule à température T .

Le champ électromagnétique émis par une particule à température T est décrit comme étant le résultat du rayonnement des charges (électrons ou ions) qui ont un mouvement d'agitation thermique. A cette agitation thermique correspond un moment dipolaire fluctuant de la particule qui peut être caractérisé par sa densité spectrale de puissance à l'équilibre thermodynamique :

$$\begin{aligned} \overline{p_x^2(t)} &= \int_0^\infty G_{p_x}(\omega) d\omega \\ G_{p_x}(\omega) &= \frac{2 \varepsilon_0 \text{Im}[\alpha(\omega)]}{\pi \omega} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \right] \hbar\omega, \end{aligned}$$

où α est la polarisabilité de la particule. Cette expression constitue un exemple du théorème de fluctuation-dissipation.

5.2.1 La permittivité diélectrique du SiC peut être décrite par le modèle de Lorentz dans l'infrarouge rappelé dans les données, au début de l'énoncé. Montrer qu'en l'absence de pertes, une nanoparticule sphérique présente une résonance pour une fréquence que l'on précisera en fonction de ε_∞ , ω_L et ω_T . Quelle est la largeur à mi-hauteur de cette résonance ?

5.2.2 Avec cette approche, nous ne sommes pas limités au calcul du rayonnement thermique en champ lointain. Calculer la densité d'énergie due au champ électrique au voisinage de la particule. On se placera à une distance pour laquelle l'approximation électrostatique est valable.

5.2.3 Calculer le rapport entre la densité d'énergie spectrale par unité de volume au voisinage de la particule et la densité d'énergie spectrale dans le vide. Expliquer pourquoi ce rapport est le rapport des densités locales d'états.

5.2.4 A l'aide de ce rapport, montrer que la densité d'énergie spectrale au voisinage de la particule peut devenir beaucoup plus grande que la densité d'énergie spectrale du rayonnement du corps noir dans le vide. On mettra en évidence un facteur lié à l'augmentation de la densité d'états par unité de volume et un facteur lié à l'augmentation de la densité d'états par unité de fréquence.

5.2.5 Tracer l'allure du spectre du rayonnement thermique au voisinage d'une particule et au voisinage de la résonance. (On ne considère que la contribution du champ électrique ici). Que peut-on dire de sa largeur en fréquence ?

5.2.6 Que peut-on dire de la cohérence temporelle du rayonnement en champ proche ? Quel est l'ordre de grandeur du temps de cohérence ?

6 Modèle semi-classique des électrons

L'objet de cette partie est de déduire les équations classiques régissant le mouvement de l'électron en partant de la mécanique quantique. Ceci va permettre de montrer que le formalisme classique est correct pourvu que la masse de l'électron soit remplacée par une masse effective dont on va analyser l'origine. Cette approche est appelée modèle semi-classique des électrons. Le cadre dans lequel on se place est un modèle simplifié pour lequel on suppose que l'on peut traiter les électrons de façon indépendante. Afin de simplifier les écritures, nous allons nous limiter à un problème à une dimension. On notera $\Psi(x, t)$ la fonction d'onde décrivant un électron.

6.1 Description quantique de l'électron

6.1.1 Rappeler quelle est la propriété de symétrie d'une fonction d'onde d'un système de fermions identiques dans la permutation de deux fermions. Expliquer pourquoi le fait d'utiliser une fonction d'onde décrivant un seul électron est une approximation.

6.1.2 Ecrire l'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ en supposant que l'électron de masse m se déplace dans un potentiel uniforme et stationnaire qui sera pris nul par convention. On cherche une solution sous la forme $\Psi_0 \exp(ikx - i\omega t)$. L'énergie de l'électron est notée $\mathcal{E}(k) = \hbar\omega(k)$. Tracer l'allure de la relation de dispersion $\omega(k)$ reliant la fréquence au vecteur d'onde.

6.1.3 Nous allons maintenant démontrer un résultat utile pour établir un lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique. Déduire de l'équation de Schrödinger, l'identité :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle, \quad (3)$$

où $[\hat{A}, \hat{H}] = \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}$ est le commutateur d'une observable $\hat{A}(t)$ avec le Hamiltonien \hat{H} et $\langle \hat{A} \rangle$ représente la valeur moyenne $\langle \Psi(t) | \hat{A}(t) | \Psi(t) \rangle$ de $\hat{A}(t)$ dans l'état $|\Psi(t)\rangle$.

6.1.4 Appliquer la formule générale (3) à l'observable \hat{X} et à l'observable \hat{P}_X . Montrer que l'on obtient une équation d'évolution des valeurs moyennes des observables :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle &= \frac{\langle \hat{P}_X \rangle}{m} \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{P}_X \rangle &= - \left\langle \frac{dV(X)}{dX} \right\rangle. \end{aligned}$$

Ces expressions constituent le théorème d'Ehrenfest. Ce résultat permet de discuter le passage à la limite classique.

6.2 Approximation semi-classique

6.2.1 Afin de retrouver l'image d'un électron localisé, nous considérons que l'état $|\Psi\rangle$ est un paquet d'ondes dont le centre est donné par $\langle \hat{X} \rangle(t)$. Il devient ainsi possible de définir une trajectoire. On rappelle que les états stationnaires solutions de l'équation de Schrödinger dans le potentiel périodique V_r sont appelés états de Bloch et caractérisés par un vecteur d'onde k : $\Psi(x) = u_k(x) \exp(ikx)$, où u_k est une fonction périodique de période a et où k appartient à la première zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$.

Expliquer pourquoi l'extension spatiale du paquet d'ondes doit être beaucoup plus grande que a si l'on veut adopter une description classique de l'électron, ce qui entraîne notamment que l'énergie et l'impulsion de l'électron doivent être bien définies.

6.2.2 On s'intéresse au mouvement d'un électron dans un métal en présence d'un champ électromagnétique dans le visible. L'électron est ainsi soumis d'une part à un potentiel périodique V_r de période a créé par le réseau cristallin et d'autre part au potentiel périodique V_E de période λ créé par le champ électromagnétique. A quelle condition peut-on considérer que $\langle \frac{dV(X)}{dX} \rangle \approx [\frac{dV(X)}{dX}]_{X=\langle \hat{X} \rangle(t)}$?

6.2.3 Expliquer pourquoi le théorème d'Ehrenfest justifie l'utilisation du principe fondamental de la dynamique lorsque l'on considère le potentiel électromagnétique mais qu'il ne permet pas de traiter classiquement l'effet du potentiel V_r du réseau cristallin.

L'objet des questions suivantes est de montrer que l'on peut prendre en compte de façon effective le potentiel du réseau en introduisant une masse effective.

6.2.4 Le calcul (que l'on ne demande pas) de la valeur moyenne de la vitesse dans un état stationnaire caractérisé par le vecteur d'onde k_0 conduit au résultat suivant :

$$\langle v \rangle_{k_0} = \left[\frac{d\omega(k)}{dk} \right]_{k_0}.$$

Pourquoi peut-on considérer que cette vitesse moyenne est la vitesse d'un électron décrit par un paquet d'ondes centré en k_0 dans l'espace des vecteurs d'onde ?

6.2.5 On note $k_0(t)$ la position centrale du paquet d'ondes dans l'espace des vecteurs d'onde à l'instant t . En calculant la variation d'énergie dE de l'électron produite par le travail d'une force F pendant dt , établir la relation :

$$\hbar \frac{dk_0(t)}{dt} = F.$$

6.2.6 En calculant la dérivée temporelle de la vitesse, montrer que l'on aboutit à :

$$\frac{d \langle v \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\omega}{dk^2} F = \frac{1}{m_{eff}} F.$$

6.2.7 Que vaut m_{eff} dans le cas d'un électron dans un potentiel uniforme ?

6.2.8 Rappeler l'allure de la relation de dispersion au voisinage de $k = \pi/a$ (on parle du bord de zone de Brillouin). En déduire que le signe de la masse effective peut être négatif au voisinage du bord de zone de Brillouin. Quelle est l'interprétation physique de ce phénomène ? (aucun calcul n'est demandé).