

CT - Physique de la matière condensée - JUIN 2023

Question 1 – (10 pts)

- Dans une expérience de diffraction de RX par un échantillon **non cristallin**, démontrez que l'intensité mesurée au niveau d'un détecteur placé loin de l'échantillon est proportionnelle à la fonction de structure (= carré du module des composantes de Fourier de la densité électronique). Expliquez votre démonstration et les approximations faites.
- Démontrez que la densité électronique d'un cristal n'a des composantes de Fourier dans l'espace des vecteurs d'onde qu'aux vecteurs du réseau réciproque du cristal.
- Appliquez b) à a) pour en déduire la condition de diffraction de Laue.

Question 2 – (5 pts)

- Dessinez la maille conventionnelle et la maille primitive d'un cristal de diamant.
- Calculez les vecteurs primitifs du réseau direct et du réseau réciproque.
- Quels sont les distances entre deux plans (111) et (100) du cristal ?

Question 3 – (5 pts)

L'interaction entre deux atomes de Xe peut être décrite par le potentiel interatomique de Lennard-Jones :

$$V(R) = 4\varepsilon \left[\frac{\sigma_{12}}{R^{12}} - \frac{\sigma_6}{R^6} \right]$$

où R est la distance séparant les atomes et $\{\sigma = 0.398 \text{ nm}, \varepsilon = 0.020 \text{ eV}\}$ sont les paramètres du potentiel.

On modélise l'énergie d'un cristal de Xe par la somme de potentiels de Lennard-Jones entre toutes les paires d'atomes du cristal. On utilise les valeurs suivantes pour les sommes de réseaux ($S_{12}=12.13$, $S_6=14.45$)

- Calculez la distance de premiers voisins entre atomes de Xe dans le cristal à l'équilibre à basses températures (on considère ici formellement $T=0 \text{ K}$).
- Calculez l'énergie de cohésion par atome dans le cristal à l'équilibre.