

**Université de Bourgogne**  
**L3 Physique - Physique Quantique de la matière condensée**  
**Prof. A. Dereux**  
**Examen écrit - 21 juin 2023**

Calculatrice de poche non intégrée dans un téléphone, règles et documents autorisés.  
Connexion à tout réseau de télécommunication interdite.

Le non respect des chiffres significatifs dans les calculs numériques sera évalué négativement.

**Question 1 (15 points – 3 points par proposition)**

Considérer les propositions suivantes. Pour chacune d'entre elles, déterminer si elle est vraie ou fausse sur la base d'un raisonnement, éventuellement illustré par un croquis (propre et lisible), long de dix à quinze lignes.

- (1) Dans une expérience de diffraction par un cristal, le contenu de la maille primitive du réseau direct se déduit des formules de la condition de Laue et de la diffraction de Bragg.
- (2) Dans l'approximation de Hartree appliquée à un atome à plusieurs électrons, les interactions entre électrons sont complètement négligées.
- (3) Lorsque la température est stabilisée, l'état de vibration d'un cristal est une combinaison linéaire des états propres de vibrations (phonons) du cristal.
- (4) Deux atomes non ionisés (chacun ayant une charge globale nulle) n'interagissent entre eux que par l'interaction de gravitation.
- (5) Dans un cristal, une quasiparticule de type phonon est un mode propre de vibration collective des atomes appartenant à un seul plan cristallin.

**Question 2 (15 points)**

Les figures 1 et 2 représentent les relations de dispersion de deux cristaux A et B. La fig.3 montre la densité d'états des phonons ((en anglais : "*Density of States*" abrégé en "*DOS*") du cristal B. Dans ces figures:

- "*Reduced wavevector coordinate*" en abscisses signifie "*vecteurs d'ondes en unité  $2\pi/a$* " où  $a$  est le paramètre cristallin.
- L'unité de fréquence (en anglais: "*Frequency*")  $\lambda^{-1}$  en ordonnées des Fig. 2 et 3 est l'inverse de longueur d'onde de la lumière dans le vide exprimée en  $[\text{cm}^{-1}]$ . Cette unité est utilisée *même si les relations de dispersion ne concernent pas la lumière*. Pour déduire la fréquence  $\nu$ , il faut faire usage de la relation  $\lambda\nu=c$  où  $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide.
- Dans la Fig.1, on ne considèrera que les courbes en traits continus car les points correspondent à des données expérimentales comparées aux courbes en traits continus.

- (1) Expliquer quel cristal correspond à InAs et quel cristal correspond à  $\text{SrCl}_2$ . (3 points)
- (2) Considérons le cristal B. À l'aide des lettres en abscisses servant de repères, expliquer à quelle caractéristique des relations de dispersion correspond le pic maximum de la densité d'états de phonons. Ces modes sont-ils excités à température ambiante (300 °K) ? Justifier avec une estimation numérique. (3 points)
- (3) Sur le chemin G-X (où G= $\Gamma$  = point Gamma = origine de la Zone de Brillouin) des relations de dispersion du cristal B, considérons le point d'abscisse X et nombre d'onde  $\lambda_x^{-1}=46 \text{ cm}^{-1}$  (branche la plus basse). Le réseau du cristal B étant cubique à faces centrées (cF) et son paramètre cristallin  $a$  valant  $4.284 \text{ \AA}$ , X est donc égal à  $(1,0,0) \ 2\pi/a$ .
  - (a) Calculer la pulsation  $\omega_1 = 2\pi \nu_1$  où  $\nu_1 = c/\lambda_x$ .
  - (b) En précisant l'unité choisie, quelle la valeur numérique  $q$  de la norme du vecteur d'onde d'un phonon correspondant à ce point  $(\omega_1, X)$  des relations de dispersion ? (1 point)
  - (c) En précisant l'unité choisie, quelle la valeur numérique de la longueur d'onde de DE BROGLIE  $\lambda_q$  d'un phonon (à ne pas confondre avec l'unité  $\lambda_x$ ) correspondant à ce point expérimental  $(\omega_1, X)$  ? (1/2 point)

- (d) En unité meV, quelle est l'énergie  $E_q$  d'un phonon correspondant à ce point expérimental ? (1/2 point)
- (e) Considérons un faisceau de neutron incident sur le cristal A. En unité meV, quelle est l'énergie  $E_0$  d'un neutron incident de longueur d'onde de DE BROGLIE égale à  $\lambda_0 = 2.8 \text{ \AA}$  ? Quelle est la norme  $k_0$  du vecteur d'onde incident ? (1 point)
- (f) Expliquer quelles sont les énergies de sortie possibles  $E_{s,1}$  et  $E_{s,2}$  des neutrons diffusés qui ont interagi inélastiquement une seule fois avec un phonon correspondant au point expérimental  $(\omega_1, X)$  ? Que valent  $E_{s,1}$  et  $E_{s,2}$  en unité meV ? Relativement à  $E_0$ , définir  $E_{s,1}$  comme l'énergie de sortie correspondant à une perte d'énergie et  $E_{s,1}$  comme l'énergie de sortie correspondant à un gain d'énergie. (1 point)
- (g) En précisant l'unité choisie, quelle est la longueur d'onde de DE BROGLIE des neutrons diffusés d'énergie  $E_{s,2}$  ? À quelle norme de vecteur d'onde  $k_s$  correspond cette longueur d'onde ? (2 points).
- (h) En supposant qu'aucun vecteur du réseau réciproque ne soit impliqué dans la conservation de la quantité de mouvement lors de l'interaction entre le neutron incident et le phonon de type  $(\omega_1, X)$ , exprimer la relation vectorielle entre le vecteur d'onde du neutron diffusé  $k_s$  (de norme  $k_s$ ) et le vecteur d'onde du neutron incident  $k_0$  (de norme  $k_0$ ) dans le membre de gauche et le vecteur d'onde du phonon  $q$  dans le membre de droite. Exprimer le carré de la norme de cette relation afin de déduire l'angle (à calculer en degrés) entre le vecteur d'onde du neutron incident  $k_0$  et le vecteur d'onde du neutron diffusé inélastiquement  $k_s$  avec l'énergie  $E_{s,2}$ . (3 points)

Rappels:  $c = 299792458 \text{ [m/s]}$   $\hbar = 6.62607015E-34 \text{ [Js]}$   $q_e = 1.602176634E-19 \text{ [C]}$   
 $k_B = 1.380640E-23 \text{ [J/K]}$   $m_n = 1.67492749804E-27 \text{ [kg]}$

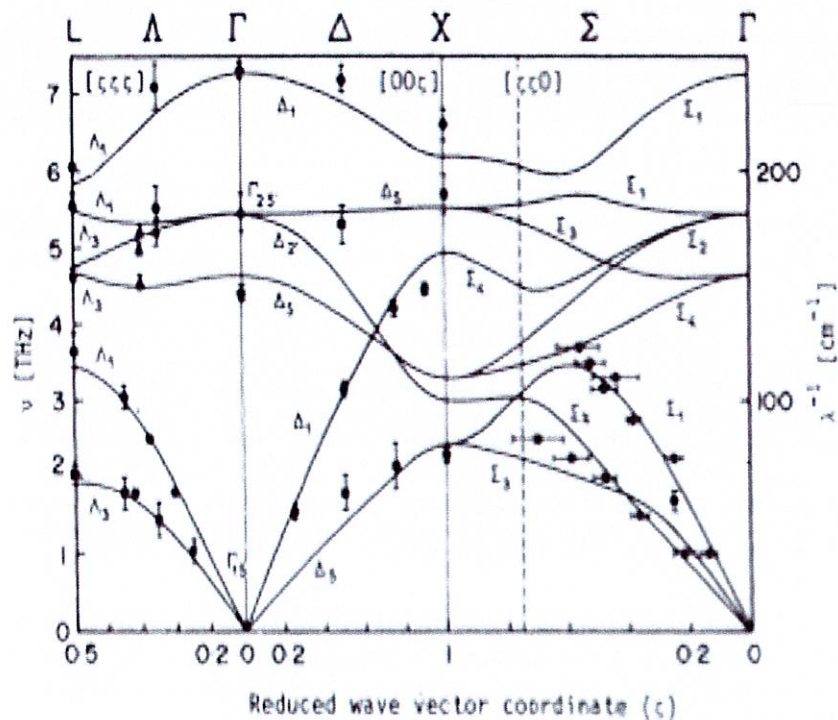


Fig.1. Relations de dispersion des phonons du cristal A (A. Sadoc *et al.*, J. Chem. Phys. Solids **37**, 197 (1976)).

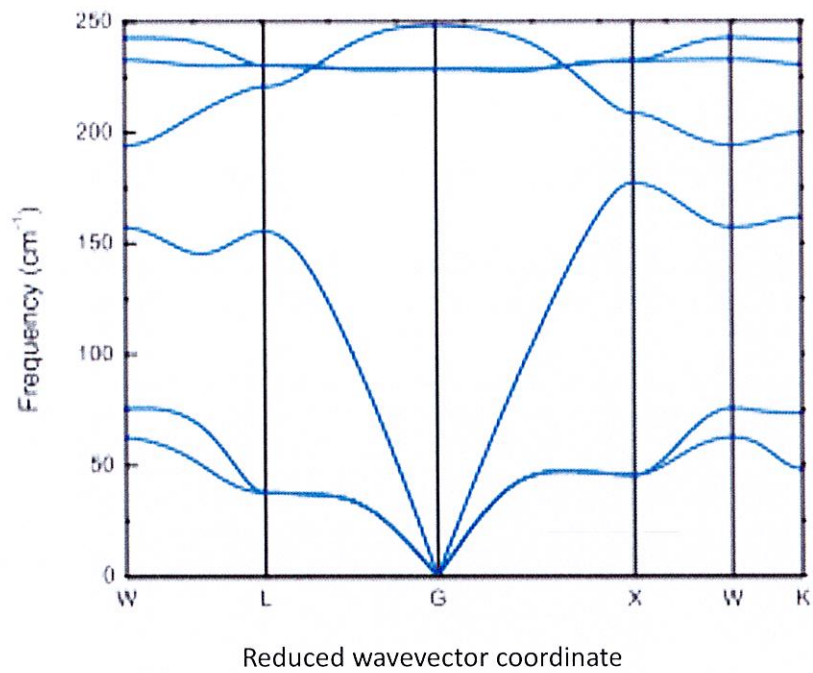


Fig.2. Relations de dispersion des phonons du cristal B (W. Mahmood *et al.*, International Journal of Modern Physics C, Vol. 31, No. 12, 2050178 (2020)).

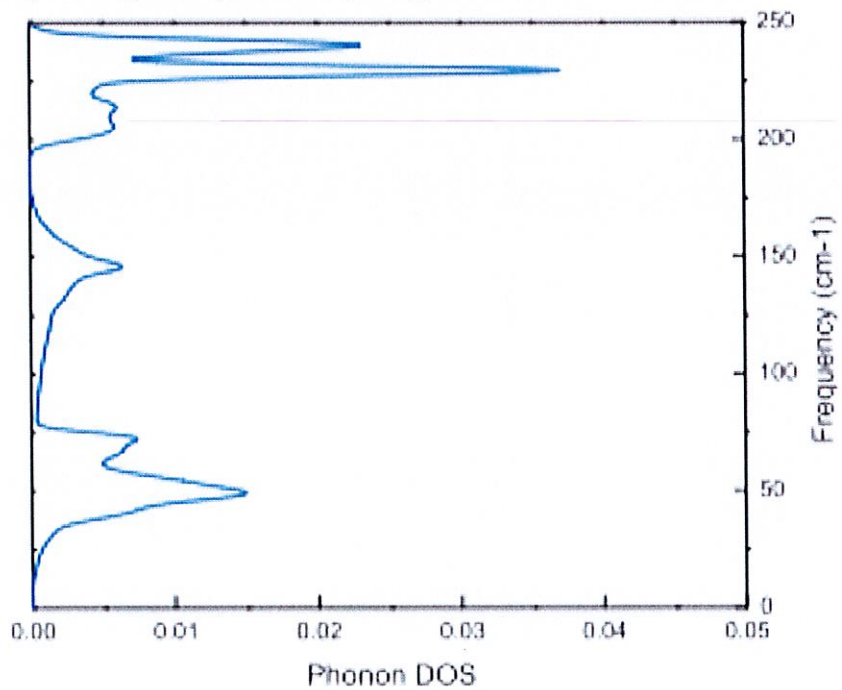


Fig.3. Densité d'états des phonons du cristal B (W. Mahmood *et al.*, International Journal of Modern Physics C, Vol. 31, No. 12, 2050178 (2020)).