

**Université de Bourgogne**  
**L3 Physique - Physique Quantique de la matière condensée**  
**Prof. A. Dereux**  
**Examen écrit - 25 juin 2024**

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)**

Les figures 1 à 3 représentent les relations de dispersion des phonons de trois cristaux A, B et C. Dans chaque graphe, on ne considèrera que les courbes en traits continus car les autres courbes ou les points correspondent respectivement à des modélisations différentes du même cristal ou à des données expérimentales comparées aux courbes en traits continus.

- (1) Expliquer quel cristal correspond à Mg, quel cristal correspond MgO et quel cristal correspond à  $MgF_2$ . (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 (énergie > 65 meV) de la densité d'états de phonons (PDOS ou "Phonon Density of States"). Ces modes sont-ils excités à température ambiante (300 °K) ? Justifier avec une estimation numérique. (3 points)
- (3) Sur le chemin  $\Gamma$ -X des relations de dispersion du cristal A, considérons le point expérimental d'abscisse X et de pulsation  $\omega_1 = 2\pi \nu$  où la fréquence  $\nu = 4$  THz. Le réseau du cristal A étant cubique à faces centrées (cF) et son paramètre cristallin  $a$  valant  $4.212 \text{ \AA}$ , X est donc égal à  $(1,0,0) \ 2\pi/a$ .
  - (a) En précisant l'unité choisie, quelle la valeur numérique  $q$  de la norme du vecteur d'onde d'un phonon correspondant à ce point expérimental  $(\omega_1, X)$  ? (1 point)
  - (b) En précisant l'unité choisie, quelle la valeur numérique de la longueur d'onde de DE BROGLIE  $\lambda_q$  d'un phonon correspondant à ce point expérimental  $(\omega_1, X)$  ? (1/2 point)
  - (c) En unité meV, quelle est l'énergie  $E_q$  d'un phonon correspondant à ce point expérimental ? (1/2 point)
  - (d) 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)
  - (e) Expliquer quelle est la seule énergie possible  $E_s$  des neutrons diffusés qui ont interagi inélastiquement une seule fois avec un phonon correspondant au point expérimental  $(\omega_1, X)$  ? Que vaut  $E_s$  en unité meV ? S'agit-il d'une perte ou d'un gain d'énergie relativement à  $E_0$  ? (1 point)
  - (f) En précisant l'unité choisie, quelle est la longueur d'onde de DE BROGLIE des neutrons diffusés d'énergie  $E_s$  ? À quelle norme de vecteur d'onde  $k_s$  correspond cette longueur d'onde ? (2 points).
  - (g) 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  $\mathbf{k}_s$  (de norme  $k_s$ ) et le vecteur d'onde du neutron incident  $\mathbf{k}_0$  (de norme  $k_0$ ) dans le membre de gauche et le vecteur d'onde du phonon  $\mathbf{q}$  dans le membre de droite. Exprimer le carré de la norme de cette relation afin de déduire l'angle (à exprimer en degrés) entre le vecteur d'onde du neutron incident  $\mathbf{k}_0$  et le vecteur d'onde du neutron diffusé inélastiquement  $\mathbf{k}_s$ . (3 points)

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

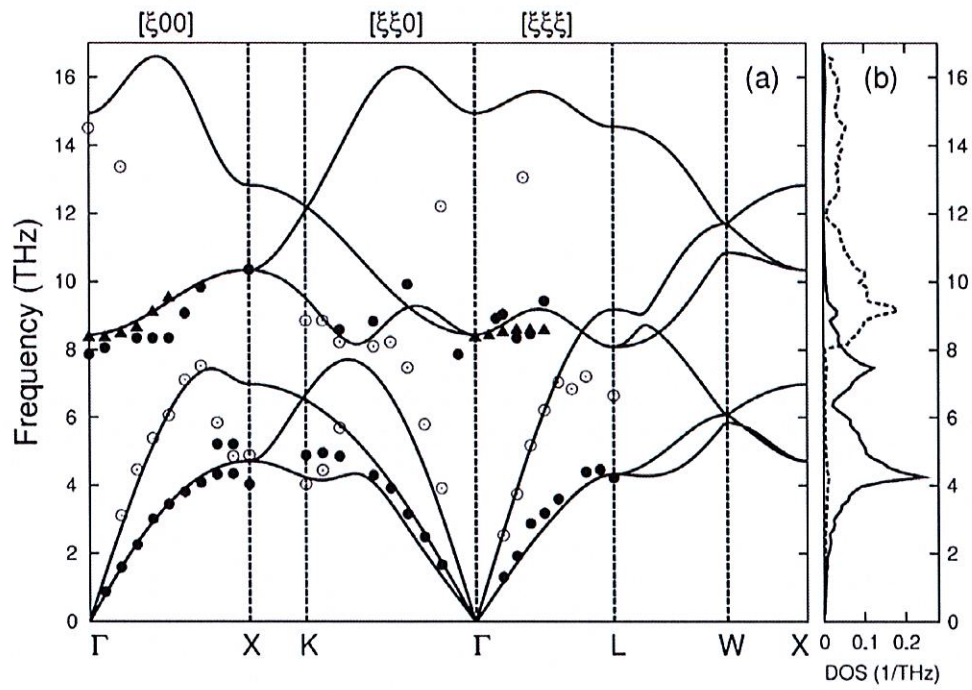


Figure 1: Relations de dispersion des phonons du cristal A.  
 Journal of Applied Physics · July 2006. DOI: 10.1063/1.2219081

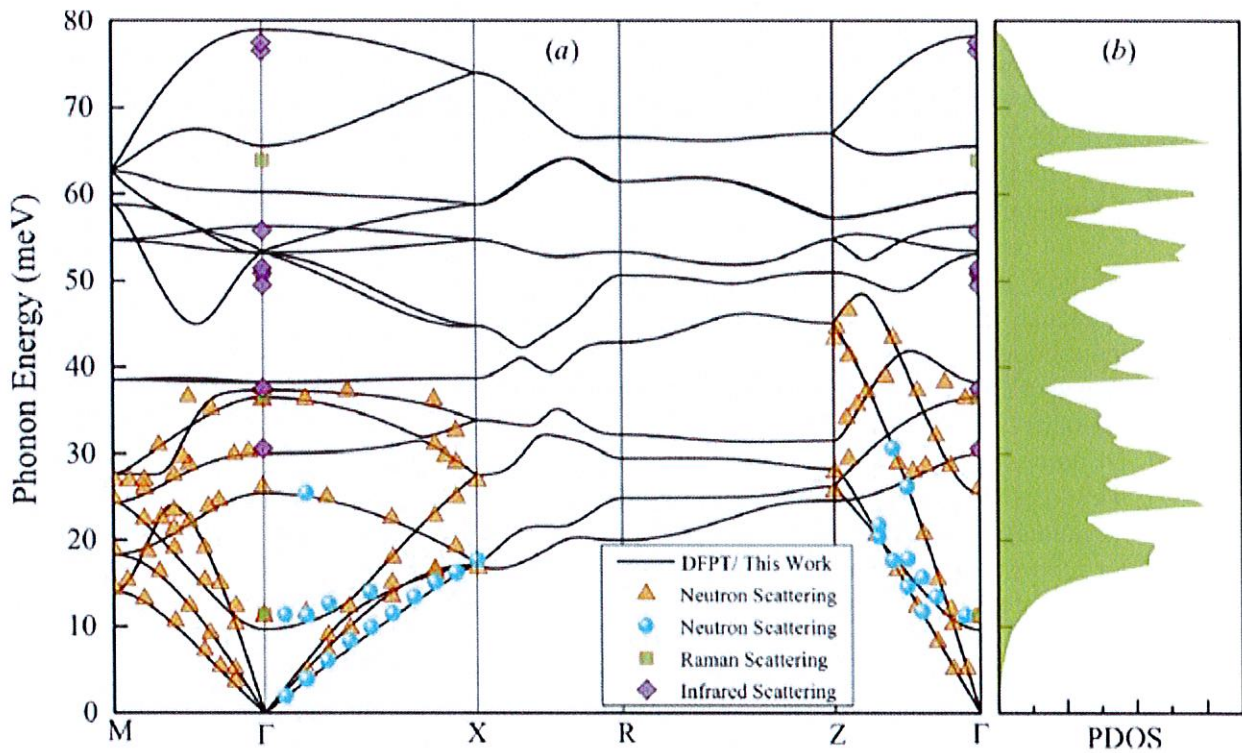


Figure 2 : Relation de Dispersion du cristal B de paramètre cristallin.  
 Journal of Applied Crystallography · April 2017. DOI: 10.1107/S1600576717000851

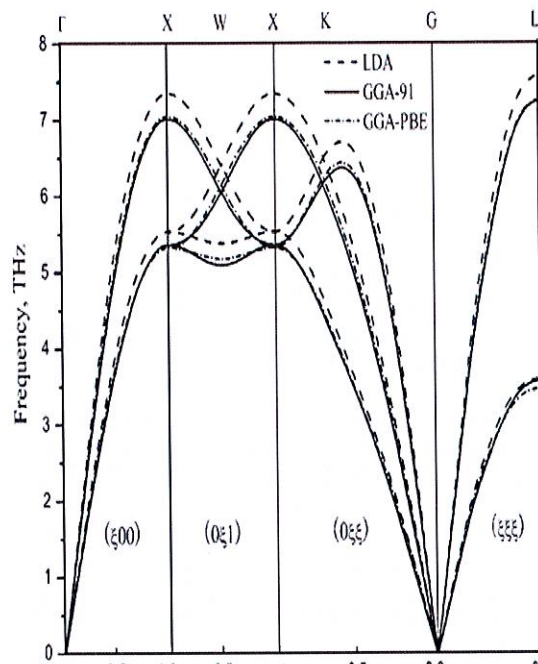


Figure 3: Relations de dispersion des phonons du cristal C  
Journal of Phase Equilibria and Diffusion · April 2011. DOI: 10.1007/s11669-011-9854-5

**Question 2 (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 l'approximation de Born-Oppenheimer, les noyaux sont considérés fixes et donc l'énergie cinétique des noyaux est nulle.
- (2) Dans la méthode LCAO, une fonction d'onde "hybride" de type  $sp^2$  possédée centrée sur un noyau d'un atome possède un maximum à la position du noyau.
- (3) Dans une expérience de diffraction inélastique des neutrons par les quasiparticules de type phonon, les formules de la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement rendent compte des chocs possibles entre un neutron incident et l'un des atomes dans la maille du réseau direct centrée à l'origine.
- (4) Dans la modélisation d'une expérience de diffraction de particules sondes par un échantillon cristallin, à grande distance de l'échantillon, l'interférence entre le champ incident et le champ diffusé est négligeable si le faisceau incident n'est pas focalisé.
- (5) Un delta de Kronecker  $\delta_{\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n}$  entre deux noeuds d'un réseau périodique  $\mathbf{R}_m$  et  $\mathbf{R}_n$  est équivalent à un delta de Dirac  $\delta(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)$ .