

Université de Bourgogne
L3 Physique - Physique Quantique de la matière condensée - Prof. A. Dereux
Examen écrit - 24 juin 2025 (session 2)

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) Dans la modélisation d'une expérience de diffraction de neutrons par un échantillon cristallin, la première approximation de Born consiste à considérer le champ incident comme une onde plane.
- (5) En mécanique quantique, l'interaction entre dipôles électriques est nécessairement répulsive.

Question 2 (15 points)

Les figures 1 à 2 représentent les relations de dispersion des phonons de deux cristaux A et B. Dans ces figures:

- Les courbes sont les modélisations de la dynamique cristalline. Les points sont des données expérimentales.
- "Reduced wavevector coordinate" signifie vecteur d'onde en unité $2\pi/a$ où a est le paramètre cristallin.
- L'unité λ^{-1} est l'inverse de longueur d'onde de la lumière dans le vide *même si les relations de dispersion ne concernent pas la lumière*. La fréquence ν est alors déduite de la relation $\lambda\nu=c$ où c est la vitesse de la lumière dans le vide et faire attention au fait que $1\text{ cm}^{-1}=100\text{ m}^{-1}$. Puisque ν diffère de λ^{-1} par un facteur constant dans ce système d'unités dit "de la lumière dans le vide", par abus de langage, λ^{-1} est souvent dénommé *fréquence* dans la littérature comme dans le présent document.

- (1) Expliquer quel cristal correspond à InAs et quel cristal correspond à SrCl_2 (3 points).
- (2) Considérons le cristal B. Sur la base des relations de dispersion fournies, expliquer aux alentours de quelle fréquence $\lambda^{-1} [\text{cm}^{-1}]$ on peut attendre le pic le plus important de la densité d'états de phonons. Ces modes sont-ils excités à 100 °K? Justifier avec une estimation numérique. (3 points)
- (3) Sur le chemin Γ -X des relations de dispersion du cristal B, considérons le phonon d'abscisse X et dont la fréquence est approximativement $\nu_q \sim 200\text{ cm}^{-1}$.
 - (a) Le réseau du cristal B étant cubique à faces centrées (cF) et son paramètre cristallin a valant $6,06\text{ \AA}$, quelle est la formule du vecteur d'onde au point X? (1 point)
 - (b) En précisant l'unité choisie, quelle est la valeur numérique q de la norme du vecteur d'onde $\mathbf{q}$ d'un phonon correspondant à ce point expérimental (ν_q, X) ? (1 point)
 - (c) En précisant l'unité choisie, quelle est la valeur numérique de la longueur d'onde de DE BROGLIE λ_q d'un phonon correspondant à ce point expérimental (ν_q, X) ? (1 point)
 - (d) À quelle énergie E_q exprimée en [meV] correspond la fréquence ν_q ? (1 point)
 - (e) Considérons un faisceau de neutron de vecteur d'onde $\mathbf{k}_0=[k_0; 0; 0]$ incident sur le cristal B. En unité meV, en utilisant la relation de dispersion qui s'applique au neutron (et non le système d'unité de la lumière dans le vide), quelle est l'énergie E_0 d'un neutron incident de longueur d'onde de DE BROGLIE égale à $\lambda_0=2.8\text{ \AA}=2\pi/k_0$? (1 point)
 - (f) 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 (ν_q, X) ? Quelle est la valeur de E_s en meV? Préciser s'il s'agit d'une perte ou d'un gain d'énergie relativement à E_0 . (1 point)
 - (g) En précisant l'unité choisie et en supposant que les neutrons diffusés avec l'énergie E_s ont interagi inélastiquement une seule fois en impliquant le vecteur du réseau réciproque $\mathbf{G}=[0; 0; 0]$, exprimer le vecteur d'onde $\mathbf{k}_s$ de ces neutrons en termes du vecteur d'onde incident $\mathbf{k}_0$ et de celui du phonon $\mathbf{q}$. (1 point).
 - (h) Effectuer le produit scalaire de cette expression avec elle-même pour déduire la formule qui donne

(i) Quelle est la valeur de cette angle en degrés ? (1 point)

