

Université de Bourgogne
L3 Physique - Physique Quantique de la matière condensée
Prof. A. Dereux
Examen écrit - 20 mai 2025

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 2 représentent les relations de dispersion des phonons de deux cristaux A et B. Le potentiel utilisé pour calculer les courbes de la figure A est harmonique tandis que celui utilisé pour calculer les courbes de la figure B est anharmonique. *On souligne que les effets anharmoniques peuvent faire surgir davantage de valeurs propres que le nombre maximal prédit par l'approximation harmonique.*

- (1) Expliquer à quel cristal correspond CuCl et quel cristal correspond à Cu_2O (3 points).
- (2) Considérons le cristal B. À l'aide des lettres en abscisses, expliquer à quelle caractéristique des relations de dispersion correspond le pic maximum (fréquence $< 125 \text{ cm}^{-1}$) de la densité d'états de phonons (DOS ou "Density of States"). 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 A, considérons le point expérimental d'abscisse X et d'énergie $E_q \sim 15 \text{ meV}$. Le réseau du cristal A étant cubique à faces centrées (cF) et son paramètre cristallin a valant $5,41 \text{ Å}$, le vecteur d'onde au point X est donc égal à $(2\pi/a, 0, 0)$.
 - (a) En précisant l'unité choisie, quelle est la valeur numérique q de la norme du vecteur d'onde d'un phonon correspondant à ce point expérimental (E_q, X) ? (1 point)
 - (b) 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 (E_q, X) ? (1 point)
 - (c) 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 $\lambda_0 = 2,8 \text{ Å}$? Quelle est la norme k_0 du vecteur d'onde incident? (1 point)
 - (d) 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 (E_q, 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)
 - (e) 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).
 - (f) En supposant que le vecteur du réseau réciproque $\mathbf{G} = (2\pi/a)(1, 1, 1)$ soit impliqué dans la conservation de la quantité de mouvement lors de l'interaction entre le neutron incident et le phonon de type (E_q, 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 la quasi-quantité-de-mouvement $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ 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)

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) Lorsque la température est stabilisée, l'état de vibration d'un cristal est dépendant de la statistique de Bose-Einstein.
- (2) Distants de 1 nm , deux atomes non ionisés (chacun ayant une charge électrique globale nulle) n'interagissent entre eux que par l'interaction de gravitation.
- (3) Une quasiparticule de type phonon est une vibration très localisée dans une maille du réseau direct.
- (4) La capacité calorifique à basse température d'un cristal monoatomique dépend de la densité d'états des phonons optiques.
- (5) L'intégrale de recouvrement de deux orbitales atomiques $1s$ centrées sur des noyaux différents est maximale et vaut 1.

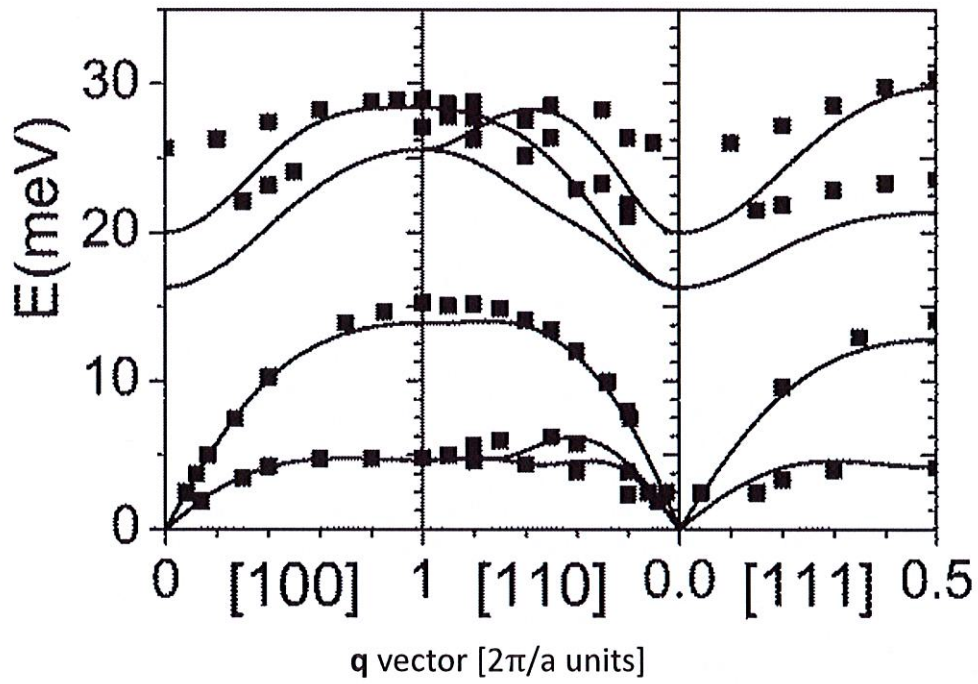


Figure 1: Traits continus: Relations de dispersion calculées des phonons du cristal A.
Les carrés noirs sont les résultats d'expériences de diffractions inélastiques de neutrons.
Source: Physical Chemistry Chemical Physics (19) 2017.

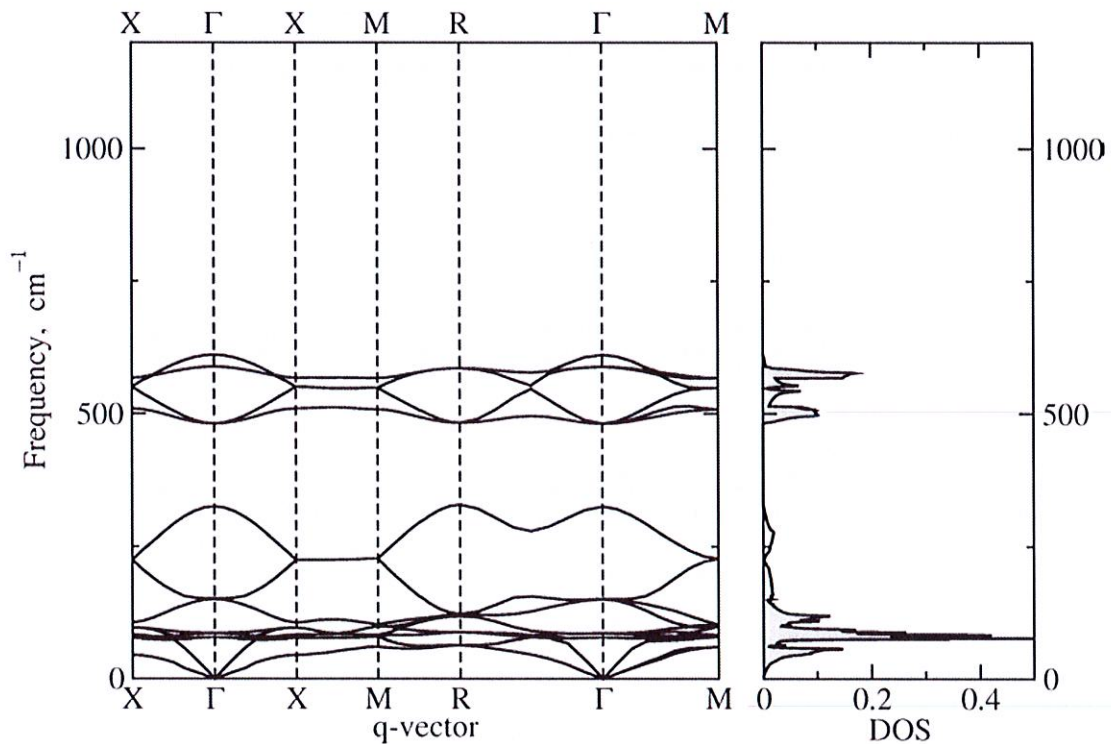


Figure 2 : Relation de dispersion des phonons du cristal B
vis-à-vis de la densité d'états (DOS: Density Of States, unités relatives)
Source: Technical Report, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, 2010.