

Université de Bourgogne
L3 Physique - Physique Quantique de l'Etat Solide
Prof. A. Dereux
Examen écrit - 22 mai 2019
Calculatrice et documents autorisés

Question 1 (12 points)

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 la méthode LCAO appliquée à la liaison chimique entre atomes, la charge électrique positive associée à l'interaction entre l'électron de Hartree et chaque noyau est égale à la valeur absolue de la charge de l'électron multipliée par le nombre atomique Z de chaque noyau.
- (2) Dans la théorie de la diffraction élastique, les coefficients de Fourier du pouvoir de diffusion d'un cristal déterminent l'intensité des pics de diffractions.
- (3) En mécanique quantique, l'interaction entre dipôles électriques est nécessairement répulsive.
- (4) Une orbitale hybride sp^2 est occupée par un électron s et 2 électrons p .
- (5) Dans un cristal, l'opérateur quantique de création d'un phonon ne dépend que des opérateurs décrivant les amplitudes de vibration de chaque atome du cristal.
- (6) L'intégrale de recouvrement de deux orbitales atomiques $1s$ centrées sur des noyaux différents est maximale et vaut 1.

Question 2 (8 points)

Les figures 1 et 2 représentent les relations de dispersion de deux cristaux A et B.

- (a) Sur la base de ces figures, expliquer quel cristal correspond à CaF_2 et à quel cristal correspond à CaO .
- (b) Considérons le cristal A. Quelles branches sont excitées à basses températures inférieures à 20 K). Quelle formule peut approximer la densité d'états à de telles basses températures.
- (c) Considérons le cristal B dans la direction de la Zone de Brillouin [001]. Quelles branches (traits continus ou interrompus) correspondent aux modes de vibrations optiques transverses ? Justifier la réponse.
- (d) Considérons le cristal A. Dans quel domaine de fréquences la densité d'états des phonons sera-t-elle la plus élevée ? Ces modes sont-ils excités à température ambiante (300 K) ?

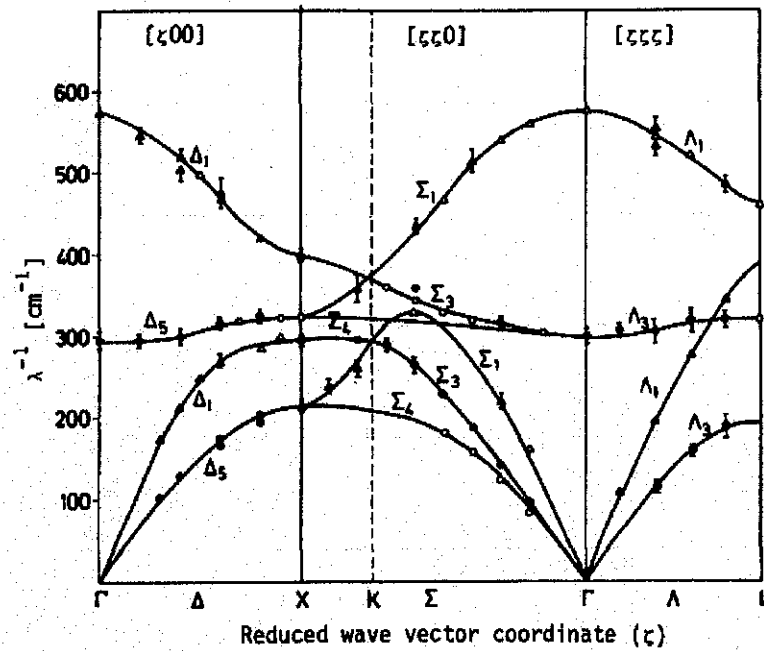


Fig.1 Relations de dispersion des phonons du cristal A mesurées par diffraction de neutrons [points expérimentaux, H.Rieder, B.A.Weinstein, M.Cardona, H.Bilz, Phys.Rev. B 8, 4780 (1973)] et calculée à l'aide d'un modèle à 11 paramètres [traits continus, "shell model", D.H.Saunderson, G.Peckham, J.Phys. C 4, 2009 (1971); R.P.Vijayaraghavan, Marsongkohari, P.K.Iyengar in: Neutron Inelastic Scattering (IAEA, Vienna 1972) p.95. Phys.Rev. B 3, 1482 (1971); 5. K.S.Upadhyaya and R.K.Singh, J.Phys.Chem Solids 36, 293 (1975)].
Attention : les ordonnées sont en unités de nombres d'ondes de photons dans le vide !

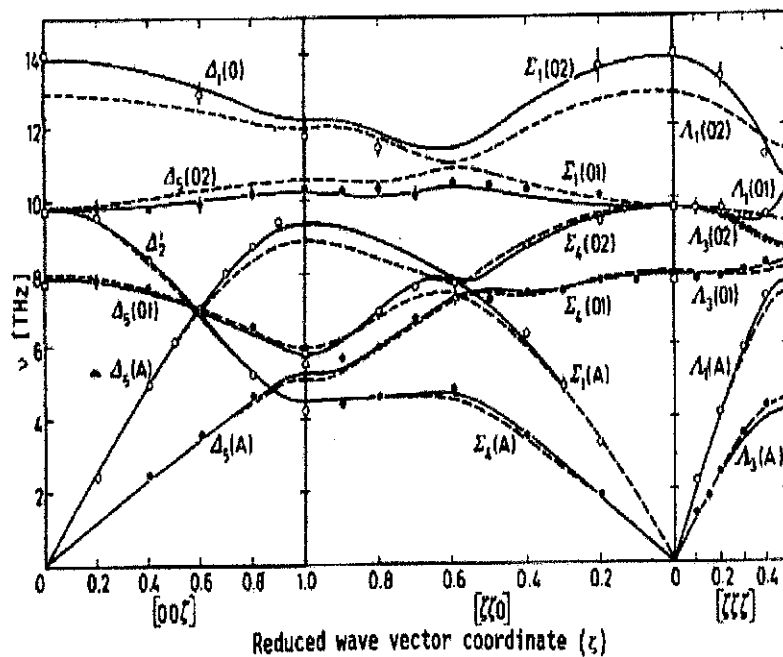


Fig.2. Relations de dispersion des phonons du cristal B (a est le paramètre cristallin) mesurée par diffraction de neutrons (points), calculée à l'aide d'un modèle à 13 paramètres ("shell model", traits continus) et par un modèle à 7 paramètres ("modèle d'ions rigides", traits interrompus) [M.M.Elcombe, A.W.Pryor, J.Phys. C 3, 492 (1970)].