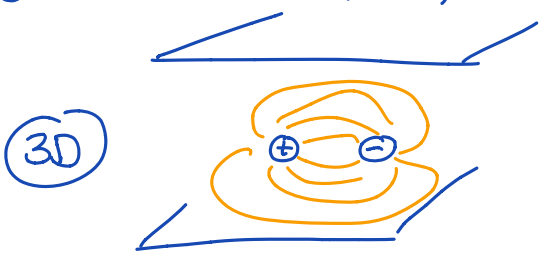
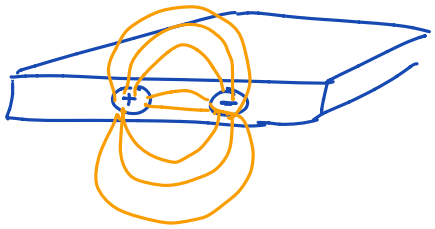
Question 1

a) L'énergie de liaison est écrantée par la permittivité relative du matériau. Ainsi, tous les électrons et protons contribuent à réduire l'interaction entre l'électron de conduction et le trou.

2 points



Pour un matériau 2D, l'interaction coulombienne n'est pas entièrement confinée au matériaux.



Ainsi, l'interaction ressemble davantage à l'interaction entre l'électron et le proton de l'atome d'hydrogène

L'énergie de liaison est donc grande.

b) $\sigma \propto \omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}}$, où $\mu = \frac{m_c \cdot m_x}{m_c + m_x}$

2 points

Il y a deux contributions à cette fréquence : K et μ

1) Dans la séquence F à I, les atomes deviennent moins électronégatifs et forment des liens plus faibles ← 1p

2) Dans la séquence F à I, la masse réduite augmente ← 1p

et contribue à réduire la fréquence

c) 2 points

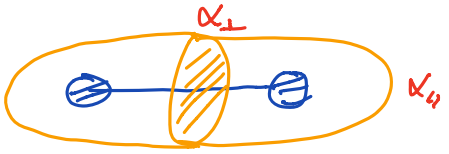
H_2O : 3 modes (0,5) CO_2 : 4 modes (0,5)

CO : 1 mode (0,5) Benzène : $12 \times 3 - 6 = 30$ modes

0,5 (0,25 si j'ai donné la formule chimique)

d) 1 point

Pour une molécule homonucléaire



de façon générale $\alpha_{//} > \alpha_\perp$

- 1 point pour une forme ellipsoïde
- 1 point pour $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_\perp \neq \alpha_{//}$

e) 1 point

Il s'agit d'un rotateur symétrique ; il n'y a pas de dipôle permanent et les modes de rotation ne peuvent absorber ou émettre de la radiation.

La polarisabilité ne varie pas lors de la rotation non plus.

Les deux méthodes ne peuvent être recommandées.

f) 2 points

$$D = \frac{4B^3}{\hbar^2 \omega_0^2} \quad \text{où} \quad B = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}$$

$$\omega_0^2 = \frac{4}{\hbar^2 D} \frac{\hbar^6}{8\mu^3 R^6} = \frac{k}{\mu} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\hbar^4}{2D\mu^2 R^6}$$

Question 2 — 6 points

a) La relation de Boltzman donne $\frac{P_n}{P_0} = \frac{e^{-E(n)/kT}}{e^{-E(0)/kT}}$ (0,5p)

où $E(n) = n\left(\hbar\omega + \frac{1}{2}\right)$ } 0,5p

Alors $\frac{P_n}{P_0} = e^{-n\hbar\omega/kT}$. $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = \sum_{n=0}^{\infty} P_0 e^{-n\hbar\omega/kT} = \frac{P_0}{1-e^{-\hbar\omega/kT}}$

$F(n) = \frac{P_n}{\sum_{n=0}^{\infty} P_n} = \boxed{e^{-n\hbar\omega/kT}\left(1-e^{-\hbar\omega/kT}\right)}$ (2p)

b) Comme $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ← décroît sur la séquence Cl_2, Br_2 et I_2
← augmente sur la séquence Cl_2, Br_2 et I_2

Donc, $\omega_{Cl_2} > \omega_{Br_2} > \omega_{I_2}$ (1 point)
A B C

c) $\omega_{mode\,1} > \omega_{mode\,2} > \omega_{mode\,3}$ (1 point)
A B C

d) $T_1 > T_2 > T_3$ (1 point)
C B A

Question 3 — 4 points

a) $\frac{dN}{dQ} \neq 0$ 0,66p , b) $\frac{dN}{dQ} = 0$ 0,66p , c) $\frac{dN}{dQ} \neq 0$ 0,66p

d) $\frac{dN}{dQ} \neq 0$ 0,66p , e) $\frac{dN}{dQ} = 0$ 0,66p , f) $\neq 0$ 0,66p

Question 4 — 5 points

a) $\sigma'_{laser} = 18797\ cm^{-1}$

$\sigma'_1 = 18497\ cm^{-1}$

$\sigma'_2 = 18297\ cm^{-1}$

$\sigma_1 = |\sigma'_1 - \sigma'_{laser}| =$ **300 cm⁻¹ 1p**

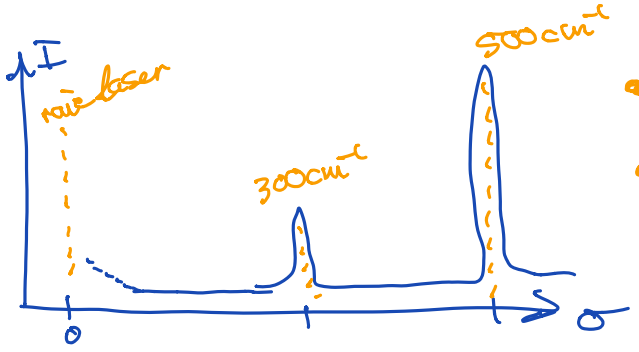
$\sigma_2 =$ **500 cm⁻¹ 1p**

b) $\lambda \rightarrow \sigma'$: nombre d'onde absolu 0,5p

σ' à σ : nombre d'onde relatif. 0,5p

σ à $-\sigma$: pour amener les raies Stokes à des fréquences positives 0,5p

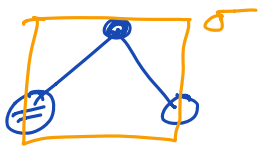
c)



- 1 point pour le graphe (axes, identification, zero)
- 0,5 point pour le spectre (energies, intensités relatives)

Question 5 — 10 points

2 points a) Eléments de symétrie : E (1p), σ (1p) $\Rightarrow$ C_s



1 point b) $3\times3-6=$ **3 modes normaux**

2 points c)

C_s	E	σ
A'	1	1
A''	1	-1
$\Gamma(3N)$	9	3

Table en annexe

trois atomes sur le plan miroir.

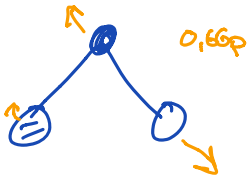
$$\Gamma(3N)=\frac{1}{2}\left[9\times1\times1+3\times1\times1\right]A'+\frac{1}{2}\left[9\times1\times1+3\times(-1)\times1\right]A''$$

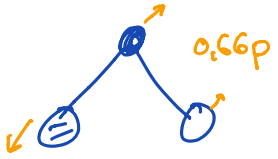
$$=6A'+3A'' \quad \text{1p}$$

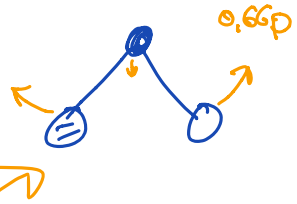
$\Gamma(\text{rotation})=A'+2A''$ $\quad$ $\Gamma(\text{translation})=2A'+A''$

$\Gamma(\text{vibration})=3A'$ 1p

2 points d) Il n'y a pas vraiment grand chose à faire

① 0,66p 

② 0,66p 

③ 0,66p 

1 point e) le mode de torsion

2 points f)

- $\frac{d\mu}{dQ}$ et $\frac{d\alpha}{dQ}$ pour tous les modes 1p
- $\langle A' | \ldots | A' \rangle$ ($\Gamma(\text{final})$; opérateur ; $\Gamma(\text{initial})$)

Tous 1p les modes sont permis en absorption et en Raman car il y a des opérateurs se transformant comme A'

#6 Absorption

10 points

1 point a) $m \propto \frac{1}{\frac{d^2E}{dk^2}}$, alors $\boxed{m_A = m \text{ et } m_B = \frac{m}{4}}$ 1p

l'inverse est aussi bon ($m_A = 4m$ et $m_B = m$)

2 points b) $\alpha \propto \nu^{3/2}\sqrt{E-E_g}$

$\alpha^2 \propto \nu^3 (E-E_g)$

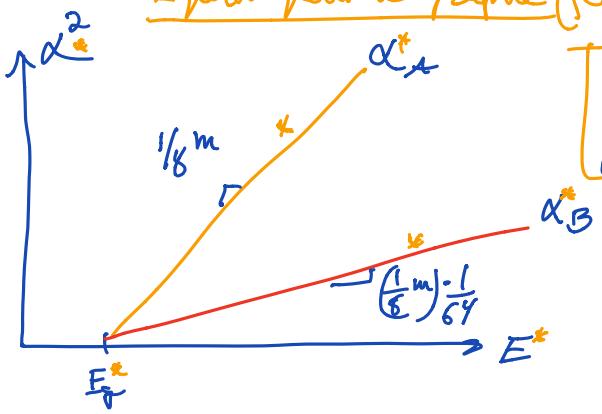
$\nu_A = \frac{m^2}{2m} = \frac{m}{2}$ $\quad \nu_B = \left(\frac{m}{4}\right)^2 \frac{1}{2\left(\frac{m}{4}\right)} = \frac{m}{8}$

1p pour le facteur

$\alpha_A^2 \propto \frac{1}{8} m(E-E_g)$

$\alpha_B^2 \propto \left(\frac{1}{64}\right) \cdot \frac{1}{8} m(E-E_g)$

1 point pour le graphe (généraliser les erreurs de graphique)



6x fois plus faible pour B

Note: le graphe peut être en α et non α^2.

2 points c) $E_x = -\underbrace{\frac{\nu}{m_0} \frac{R_\infty}{\epsilon_r^2}}_{0{,}5p}$

$E_{x,A} = -\frac{\nu_A}{m_0} \frac{R_\infty}{\epsilon_r^2} = \frac{1}{2}\left(\frac{m}{m_0}\right)\left(\frac{R_\infty}{\epsilon_r^2}\right)$

$E_{x,B} = -\frac{\nu_B}{m_0} \frac{R_\infty}{\epsilon_r^2} = \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{2}\left(\frac{m}{m_0}\right)\left(\frac{R_\infty}{\epsilon_r^2}\right)$

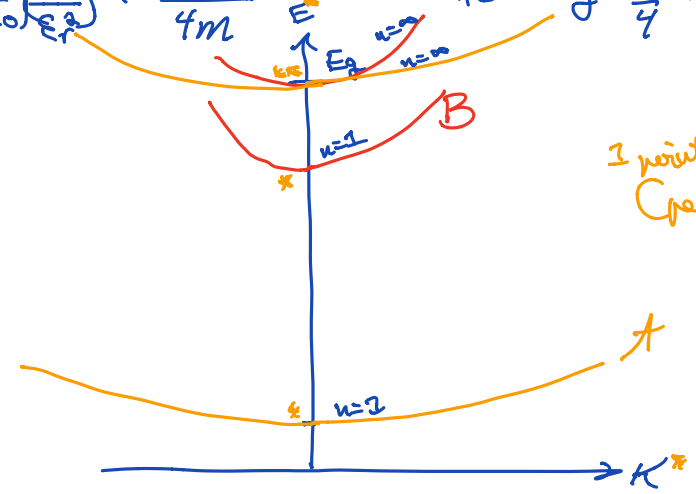
4x plus faible pour B 1,5p

2 points d) $E_x = E_g - \frac{\nu}{m_0}\frac{1}{\epsilon_r^2}\frac{R_\infty}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\cdot 2m}$ } 0,5p

0,5p

4x plus grand

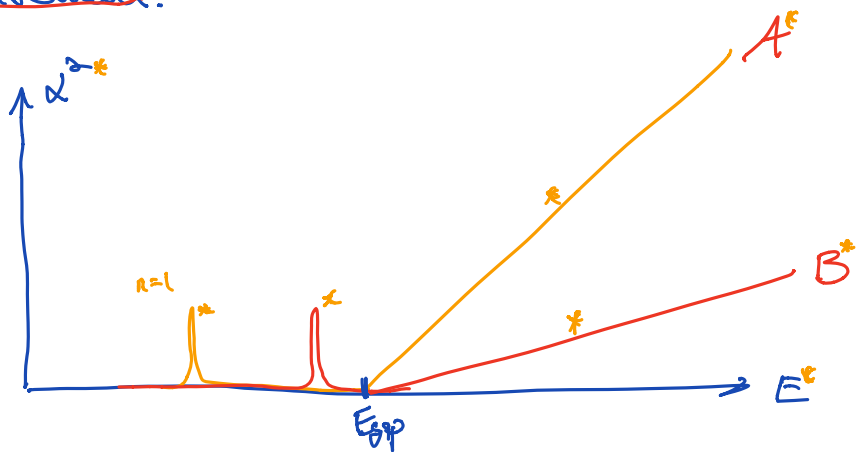
$E_{x,A} = E_g - \frac{1}{2}\left(\frac{m}{m_0}\frac{R_\infty}{\epsilon_r^2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{4m}$ $\quad E_{x,B} = E_g - \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{2}\left(\frac{m}{m_0}\frac{R_\infty}{\epsilon_r^2}\right) + \frac{4\hbar^2 k^2}{4m}$



1 point pour le graphe (généraliser les erreurs de graphique)

1 point e) En $K=0$, car le photon porte très peu de quantité de mouvement.

1 point f)



0,5 point BONUS

g) Si $E_{excitation} \geq E_{ion}$, l'exciton se dissocie.

Evidemment, pour une population d'exciton comparable, les températures pourront être 4 fois plus grande pour A.

Question #7 — 5 points

a) — 3 points

MoS_2 : SC (0,5p) à gap direct (0,5p) (gap ~ 2eV)

ZrS_2 : SC (0,5p) à gap indirect (0,5p) (gap ~ 1eV)

NbS_2 : métallique (0,5p)

PdS_2 : métallique (0,5p)

b) — 2 points

MoS_2 : transparent pour $\lambda > 620$ nm (théorie) / $\lambda < 620$ nm
- Couleur rougeâtre
- Semi transparent

(0,5p)

ZrS_2 : transparent pour $\lambda > 1200$ nm (théorie) pour $\lambda < 1200$ nm
- Essentiellement opaque
- D'apparence noire

(0,5p)

NbS_2 : (0,5p)
- apparence métallique, mais plutôt terne
- car il y a aussi de l'absorption pour toutes les λ visibles.

PdS_2 : (0,5p) idem que NbS_2