

Chapitre 1

- mesure modifie l'état du système → il reste après la mesure
- l'évolution est régie par l'éq de S. → linéaire (+ principe de superposition)
- grandeur = opérateur linéaire hermitien
- la mesure projette l'état quantique sur l'état propre (réduction paquet ondes) et est non linéaire.
- particules quantiques : dénombrables ; délocalisés ; interfèrent
- proba de présence $\rho(x,y,z) = |\Psi(x,y,z,t)|^2$ dndndydz autour de \vec{r} $\vec{r} = |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$
- Ψ normalisée $\int |\Psi|^2 d^3r = 1$: continue ; dérivable
- en 1D : solution sommes d'ondes planes $e^{i(kx - \omega t)}$ (electron)
- l'objet garde au cours du tps la m distribution de proba. qui se décale de x à la vitesse v_g
- $\lambda = \frac{2\pi h}{p} = \frac{2\pi h}{mv} \Rightarrow p = h \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow$ correspond bien à la quantité de mouvement classique par une part. de masse m
- énergie cinétique $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2 k^2}{2m}$ Relation Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2}$

- Eq. de S. $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$ force $i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi$
- Etat stationnaire $|\Psi|^2$ dépend tps
- ondes planes = états sta. particule libre ($V=0$)
- $\langle \Psi | \Psi \rangle = \int |\Psi|^2 d^3r \Rightarrow |\Psi\rangle = \sum \langle \Psi_n | \Psi \rangle | \Psi_n \rangle$
- $\langle x \rangle = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle \Rightarrow \Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$
- \hat{H} : opérateur hamiltonien qui est l'observable associée à l'E. totale du syst
- $\Rightarrow E_n \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \hat{H} \langle \Psi_n | \Psi \rangle \Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \sum c_n(t) | \Psi_n \rangle$ ou $c_n(t) = \langle \Psi_n | \Psi(t) \rangle$
- syst dans l'état propre de \hat{H} ne varient pas au cours du tps → stat. → énergie = valeur propre de \hat{H} ($= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ pour $V=0$)
- $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ densité proba de détection en \vec{r}
- Grandeurs physique corr. observables \hat{A} obs. $\{ \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \}$ valeur vecteurs
- max. état possible de proba $\langle \Psi_n | \Psi \rangle^2$
- 2 puits finis : proba d'être ds 2 puits = oscillante
- nV états statio. = comb. linéaire des 2 puits seuls
- proba de présence
- symétrie

TD 3 → puits couples $|\Psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$

- dans un puit simple $|\Psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$ $\Psi(x) = \begin{pmatrix} c_1(x) \\ c_2(x) \end{pmatrix}$ amplitude de proba de chacun des états
- * $i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi \Rightarrow \Psi(x,t) = \begin{pmatrix} \hat{I} & -i\hat{H}t \\ \hat{H} & \hat{I} \end{pmatrix} \Psi(x) \Rightarrow$ matrice
- pour puit non couples $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}$ couple $\begin{pmatrix} E_0 - A & A \\ A & E_0 \end{pmatrix} \Rightarrow H_{12} = H_{21} = A$
- sol de $\Psi \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1(x) \\ c_2(x) \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = e^{-iEt/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(\frac{At}{\hbar}) & i\sin(\frac{At}{\hbar}) \\ i\sin(\frac{At}{\hbar}) & \cos(\frac{At}{\hbar}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \end{pmatrix}$ ampli proba
- la particule oscille entre 2 états ≠ stationnaires
- * chgt base matrice de rotation $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} |1\rangle & |2\rangle \\ |1\rangle & |2\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} |1\rangle + |2\rangle \\ |1\rangle - |2\rangle \end{pmatrix}$
- * $i\hbar \frac{\partial \langle n | \Psi(t) \rangle}{\partial t} = -A \langle n-1 | \Psi(t) \rangle + E_n \langle n | \Psi(t) \rangle - A \langle n+1 | \Psi(t) \rangle$ $E_1 = \frac{1}{2}(E_0 - A)$ $E_2 = \frac{1}{2}(E_0 + A)$
- Si $\Psi_n(t) = a_n e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow E - E_n = -A \frac{a_{n+1} + a_{n-1}}{a_n} \Rightarrow a_{n+1} + a_{n-1} = a_n \frac{E - E_n}{A}$ * $a_{n+1} = a_n$
- Donc $r = \exp(2i\pi \frac{m}{\hbar}) \Rightarrow r = \exp(i\pi k b)$ $\Rightarrow r^2 + 2sr + 1 = 0$
- $s = -\cos(2\pi \frac{m}{\hbar}) \Rightarrow \frac{E - E_0}{2A} = -\cos(kb) \Rightarrow E = E_0 + E_c$ $E_c = -2A + A\hbar^2 b^2$
- $\omega = \frac{E}{\hbar}$

TD 4 → opérateurs

- * proba détection $\langle \Psi | \Psi \rangle = |c_n|^2 = |\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2$
- * Ψ sur $|x\rangle$ base $|\Psi\rangle = \int \Psi(x) |x\rangle dx \Rightarrow \langle x_0 | \Psi \rangle = \int \Psi(x) \delta(x-x_0) dx = \Psi(x_0)$
- * Moyenne pondérée de la grandeur $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$
- * $|\Psi\rangle = \int \Psi(x) |x\rangle dx \Leftrightarrow \langle x | \Psi \rangle = \Psi(x)$
- * $\Psi(\vec{r})$ et $\Psi(\vec{p})$ sont TF l'une de l'autre. 2 représentations équivalentes m'état
- $\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \Psi(\vec{r}) \quad \langle \vec{r} | \hat{r} | \Psi \rangle = \vec{r} \Psi(\vec{r}) \quad \langle \vec{r} | \hat{p} | \Psi \rangle = -i\hbar \nabla \Psi(\vec{r})$
- * $\langle \vec{r} | \hat{p} | \Psi \rangle = -i\hbar \nabla \Psi(\vec{r})$
- $[A\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$
- métrocentre paquet onde = meca quantique

TD 1 → paquet d'onde

- * position de la particule : proba de présence max en $x=0$ et concentrée dans intervalle de largeur $\sim \Delta x$ ($\langle x \rangle = \int x |\Psi|^2 dx = 0$)
- * Si Ψ admet transformée F. $\Psi(x,t=0) = \Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}_0(k) e^{ikx} dk$ et $\tilde{\Psi}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) e^{-ikx} dx$ table F.
- * Particule libre 1D : sol stat. = ondes planes $e^{i(kx - \omega t)}$
- * $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{\Psi}_0(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$ $\omega = \omega_0 + v_g(k - k_0)$
- $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k v_g}{\hbar k} = \frac{\hbar v_g}{m}$ → appariation $\Psi_0(x - v_g t)$
- $\hbar k = \hbar k_0 \rightarrow$ énergie cinétique $\hbar \hbar k_0 \rightarrow$ quantité mv
- $\Delta x \Delta k = 1 \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \hbar \Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{m \Delta v}$

TD 2 → puit quantique isolé

- Profondeur infini
- * Eq de S $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E \Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0 \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow \Psi = A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- $\Psi(x=0) = \Psi(x=L) = 0 \Rightarrow \Psi = A \sin(kx) \quad k = \frac{n\pi}{L}$
- * $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$
- * Electrons occupent les états d'E les plus bass avec des spins ≠
- * $L \uparrow \Rightarrow E$ se rapprochent
- * $L \rightarrow 10^7$ fois \Rightarrow 2×10^7 elec. qui peuvent avec 2 spins $\Rightarrow N_{max} = 10^7$
- * Pour passer à un état excité. $\Delta E = E(N+1) - E(N)$
- * resserrement des nv d'E autorisées qui conduit à des états quasi-continus
- Profondeur fini
- * centre : $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0 \quad \Psi(x) = A \sin(kx + \delta)$
- autour $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - k^2 \Psi = 0 \quad \Psi(x) = C e^{-kx}$ ou $\Psi(x) = D e^{-k(L-x)}$
- continuité $\Psi(x)$ et dérivée en $x=0$ et $x=L$ $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \Psi^*(x) dx = 1$
- $\delta = -\frac{\hbar k}{2} + \frac{\pi}{2}$ $\frac{\hbar k}{2} = \cot\left(\frac{\pi}{2} - \frac{kL}{2}\right)$ * $\frac{1}{1 + \cot^2} = \sin^2$ $\frac{1}{1 + \cot^2} = \frac{\sin^2}{1 + \cot^2} = \frac{\sin^2}{1 + \frac{\cos^2}{\sin^2}} = \frac{\sin^4}{1 + \cos^2}$
- * $\frac{E}{V_1} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m V_1} \neq \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{E}{V_2}$
- Nombre niveau $N \geq \frac{k_{max} L}{\pi} \geq N - 1$
- Étalées $0 < E < V_1 \Rightarrow k_L = \pi \mp 2 \arcsin\left(\frac{R_L}{R_{mL}}\right)$
- On pose $k_m = \frac{k_{max}}{\hbar} \Rightarrow N \geq \frac{k_m L}{\pi} \geq N - 1$

TD 5 → Oscillateur

- * $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \Rightarrow \tilde{H} = \frac{1}{2} (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2) \oplus (\tilde{X}, \tilde{P}) (X, P) = 2\tilde{H} - 1$
- Si 2 op. se déduisent seulement par une cot → les grandeurs sont mesurables → base vecteurs propres
- on trouve les valeurs propre de \hat{H} communs
- donc l'énergie est quantifiée

Chapitre 2 → Ψ statique

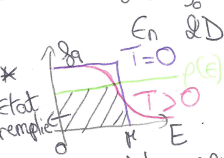
- * \oplus puit $\uparrow \rightarrow \oplus$ niveau E sont serrés
- * $\oplus N_p \uparrow \rightarrow$ valeur de E_f sont serrées
- * état eq = plus probable → bcp de conf possible → méconnaissance de la répartition
- à l'eq → maximisation de l'entropie statique de la répartition
- * 1er principe $\Delta U = Q + W$ 2em principe S est ou \uparrow par syst isolé
- * système isolé = microcanonique $S = k_B \log(\Omega)$ microétats équiprob.
- * syst. avec thermos. → canonique $V_j \quad P_j = \frac{\exp(-\beta E_j)}{Z}$ loi de Boltzman
- * syst thermos + échange → grand canonique $P_j = \frac{\exp(-\beta(E_j - \mu N_j))}{Z_{GC}}$ loi Gibbs
- $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$ μ potentiel chimique
- objet macros. E structure peu.
- * bosons → symétrique (spin entier)
- * fermions → antisym. \Rightarrow 2 fermions occupent pas le m'état quantique
- * fermi-Dirac $f(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \epsilon_f}{k_B T}\right)}$ ϵ_f niv de fermi (μ) $n(\epsilon)$ nb état à E donnée.
- $N = \int f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon / U = \int \epsilon g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$ $g(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon}$ densité état
- limite. $\epsilon - \epsilon_f \gg k_B T \quad f(\epsilon) \approx \exp\left(-\frac{\epsilon - \epsilon_f}{k_B T}\right) =$ Boltzman $g(\epsilon) d\epsilon \rightarrow$ nb d'état d'énergie entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$
- * Bose-Einstein $\langle n \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(\epsilon - \mu)) - 1}$ * $f(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\beta \epsilon) - 1}$

[TD 6] → Maxwell-Boltzmann

* $\int p_i = 1 \Rightarrow Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}$ ($p_i = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \epsilon_i)$)
 Soit $Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i} = \frac{1}{V_{malle}} \int e^{-\beta \epsilon} d\Omega = \int e^{-\beta \epsilon} \rho(\epsilon) d\epsilon$ ($\rho(\epsilon) = \sum_i \delta(\epsilon - \epsilon_i)$)
 passage discret continu $\Rightarrow \times \frac{1}{V_{malle}} \approx \frac{\pi}{L}$
 Si $(\epsilon_a, \epsilon_b) \in [2\epsilon_a, 2\epsilon_b]$ $\rho^2 = \frac{1}{2} \exp(-2\beta \epsilon_a) \Rightarrow$ loi de Boltzmann
 Indiscernable (a,2; b,0) $\rho(a,b) = \rho(a,2;b,0) + \rho(a,1;b,1) + \rho(a,0;b,2)$
 Si $2a \neq 2b$ pas MB.
 Loi MB pas pour particules indiscernables sauf si $(\epsilon_a, \epsilon_b) \ll \frac{1}{\beta} = k_B T$
 $\rightarrow T$ haute

[TD 7] → Fermi Dirac

* Pour une boîte dD $E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi^2}{L_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2}{L_y^2} n_y^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$
 Nb état par intervalle élémentaire $\frac{L_x L_y d\Omega}{(2\pi)^2} \Rightarrow$ densité d'états en k
 \Rightarrow densité d'état en $k: \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \rho(k) \times \text{spin}$
 $\rho(k) = \frac{dn}{d\epsilon} = \frac{dn}{dk} \frac{dk}{d\epsilon} = \frac{dn}{dk} \frac{1}{\hbar v} = \frac{m}{\hbar^2} \rho(\epsilon)$
 1D $\frac{1}{|v|}$ densité d'état énergétique
 3D $\frac{1}{\epsilon}$ densité d'état énergétique
 * $N = \int \rho(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$
 $N = \rho(\epsilon) k_B T \ln(1 + \exp(\mu/k_B T))$
 * T élevés Max. Boltz. \rightarrow nu Fermi
 $\rightarrow T=0$ $N = \frac{m A}{\pi \hbar^2} E_F$
 * $\bar{E} = E \times N \rightarrow$ énergie moyenne $\mu = 0$ $\bar{E} = \frac{E_F}{2}$
 * $P = - \frac{dE}{dV} \Rightarrow$ gaz fermion peu compressible (Pauli)



[TD 8] → modèle Krönig-Penney

* cristal = périodicité des atomes \approx puits de potentiel
 * eq de S \oplus sol générale \oplus condition aux limites (continuité + dérivabilité)
 \Rightarrow $f(x)$ nulle \neq $f(x)$ ondes \neq état stationnaire \Rightarrow annule de déterminant.
 * la quantification si le cristal est fini \Rightarrow si $\psi(x+N_a) = \psi(x) \Rightarrow k = \frac{2\pi}{N_a} q \in \mathbb{Z}$
 * effet Tunnel $|B| \ll 1$
 * $F(\alpha x) = \cos(\alpha x) + P \sin(\alpha x) \Rightarrow |F| < 1 \Rightarrow$ bande permises/interdites
 * Si $\cos(ka) = \cos(\alpha a) \Rightarrow ka = \alpha a \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \oplus k$ multiple $\frac{\pi}{a}$

[TD 9] → jonction PN

* porteurs: ν particules ou pseudo-particules porteuse charge e et libre de se déplacer à l'intérieur de la matière
 $N \rightarrow$ elec bande conduction
 $P \rightarrow$ trou bande valence
 * $\rho(\epsilon) = \exp(\frac{E_F - \epsilon}{k_B T})$ $N = \int \rho(\epsilon) \rho(\epsilon) d\epsilon$ $n = \int \rho(\epsilon) d\epsilon$
 $\Rightarrow np = N_v N_c \exp(-E_g/k_B T) = n_i^2$ densité intrinsèque avec T donc peut varier avec dopage
 * Présence chips elec: courant conduction
 gradient porteurs: courant diffusion
 * \Rightarrow zone de charge d'espace (ZCE) sans porteurs chargés par la présence d'ions

 $\text{dim } E = \frac{P}{\epsilon}$
 $E = -\text{grad } V$

Chapitre 3 → suite

* ordre de grandeur $10^{23} \text{ m}^{-3} = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ densité electron de valence dans la bande de conduction semi-conducteur $E_g \approx 1 \text{ eV}$
 * Doper N $\rightarrow e^-$ Doper P \rightarrow trou $p = \frac{N_A}{N}$
 * e^- BC trou BV
 $\rho(\epsilon) = \exp(\frac{E_F - \epsilon}{k_B T})$ $1 - \rho(\epsilon) = \exp(\frac{\epsilon - E_F}{k_B T})$
 $\rho(\epsilon) = \exp(\frac{E_C - \epsilon}{k_B T}) \exp(\frac{E_F - E_C}{k_B T})$ $1 - \rho(\epsilon) = \exp(\frac{E - E_V}{k_B T}) \exp(\frac{E_V - E_F}{k_B T})$
 $n = n_i \exp(\frac{E_F - E_C}{k_B T})$ $p = p_i \exp(\frac{E_V - E_F}{k_B T})$
 $n = N_c \exp(\frac{E_F - E_C}{k_B T})$ $p = N_v \exp(\frac{E_V - E_F}{k_B T})$
 est indep. des dopage
 * forme exp de la loi régnant nb porteur \Rightarrow variations densité porteur \Rightarrow conluc \rightarrow isolant
 * niveau fermi \neq selon dopage milieu \Rightarrow recherche à contrôler la densité porteur de charge qui peuvent varier
 * Courant elec (chip elec) $J_{cond} = J_{nc} + J_{ps} = (n\mu_n + p\mu_p) q E$
 Courant d'agg $J_{agg} = J_{diff} + J_{agg} = q(D_n \text{grad}(n) - D_p \text{grad}(p))$
 $J_T = J_n + J_p$

region P $n = A/N_A$ $E_C^P = E_g - k_B T \ln(A/N_c N_A) \Rightarrow E_C$ niv fermi sont alignés
 $N = N_D$ $E_V^N = E_F - k_B T \ln(N_D/N_v)$ $E_C^P - E_V^N = qV_0$ barrière potentiel
 \Rightarrow la brutale densité charge aux bords ZCE car variation exp. de la densité de porteurs moy qui \rightarrow à cause courbure des bandes

 ① Conduction minoritaire e^- $\rightarrow \rho(\epsilon) E_C^P$
 ② Courant diff. majoritaire e^- $\rightarrow \rho(\epsilon) E_C^N + qV_0$
 Δ Si V_{app} ① on ② $E_C^N + qV_0$
 $I(V_{app}) = I_{diff}(V_{app}) + I_{ion}(V_{app})$
 $= I_{diff}(0) [e^{\frac{qV_{app}}{k_B T}} - 1]$
 \Rightarrow DIODE

[TD 10] → Diode

* Modèle de courant qui traverse la diode $I(V) = I_s [e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1]$
 * capacité jonction: A l'interface ZCE sans porteur \Rightarrow isolante
 Il y a un chips elec. max à la jonction.
 * $C = \frac{\epsilon S}{W}$ loi de poisson $\frac{dE}{dx} = \frac{q}{\epsilon} \rho$ $E = -\frac{dV}{dx}$
 * Charge égale des 2 côtés (neutralité composant) \oplus densités charges = densités de dopants $n_p N_D = p_p N_A$
 $\Rightarrow V(-n_p) - V(n_p) = -\frac{q N_D \epsilon^2}{2} \frac{1}{\epsilon}$

[Bilan]

* Krönig-Penney: e^- de bord de bande se comp. comme e^- libre avec $m \neq 1$
 * Dopage N $\rightarrow E_F$ au dessus E_C
 * Dopage P $\rightarrow E_F$ en dessous E_V
 * Semi-conducteur neutre
 * Jonction PN à l'Eq $J_{diff} + J_{cond} = 0$
 global + pour dopage type porteur
 E_C s'alignent par l'at
 - diff de potentiel entre Met P
 * Δ m sans tension \neq potentiel mais pas courant
 * ZCE \rightarrow dope sans porteur \neq charge conductrice neutre mais ions dopants

[Chapitre 3]

* 3 cas: conducteur \leftarrow isolant \rightarrow semi-conducteur
 chips elec dans le matériau
 Semi-conducteur intrinsèque $n_i = \sqrt{\int \rho(\epsilon) \rho(\epsilon) d\epsilon}$
 $\rho(\epsilon)$ densité d'état
 $f(\epsilon)$ occupation moyenne

