

Physique des semi-conducteurs

Tout le catalogue sur
www.dunod.com



Christian Ngô
Hélène Ngô

Physique

des semi-conducteurs

Cours et exercices corrigés

4^e édition

DUNOD

Illustration de couverture : © DJM-Photo – Fotolia.com

<p>Le pictogramme qui figure ci-contre mérite une explication. Son objet est d'alerter le lecteur sur la menace que représente pour l'avenir de l'écrit, particulièrement dans le domaine de l'édition technique et universitaire, le développement massif du photocopillage.</p> <p>Le Code de la propriété intellectuelle du 1^{er} juillet 1992 interdit en effet expressément la photocopie à usage collectif sans autorisation des ayants droit. Or, cette pratique s'est généralisée dans les établissements</p>	<p>d'enseignement supérieur, provoquant une baisse brutale des achats de livres et de revues, au point que la possibilité même pour les auteurs de créer des œuvres nouvelles et de les faire éditer correctement est aujourd'hui menacée.</p> <p>Nous rappelons donc que toute reproduction, partielle ou totale, de la présente publication est interdite sans autorisation de l'auteur, de son éditeur ou du Centre français d'exploitation du droit de copie (CFC, 20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris).</p>
--	--



DANGER
LE PHOTOCOPIAGE
TUE LE LIVRE

© Dunod, Paris, 1998, 2003, 2007, 2012
ISBN 978-2-10-057896-2

Le Code de la propriété intellectuelle n'autorisant, aux termes de l'article L. 122-5, 2° et 3° a), d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective » et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (art. L. 122-4).

Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles L. 335-2 et suivants du Code de la propriété intellectuelle.

Table des matières

AVANT-PROPOS	xi
RAPPELS UTILES	xiv
CHAPITRE 1 • PHYSIQUE QUANTIQUE	1
1.1 Dualité onde-corpuscule	2
1.2 Relation de de Broglie	3
1.3 Postulats	4
1.4 États stationnaires	6
1.5 Mesures simultanées d'observables	6
1.6 Relations d'incertitude	7
1.7 Nombres quantiques	8
1.8 Spin	8
1.9 Bosons et fermions	9
1.10 Quantique ou classique ?	9
1.11 États liés et états du continu	10
Exercices	15
Corrigés	16
CHAPITRE 2 • PHYSIQUE STATISTIQUE	17
2.1 Postulats	17
2.2 Entropie statistique	18
2.3 Travail, chaleur	20
2.4 Conditions d'équilibre	21
2.5 Ensembles	24
2.6 Théorème d'équipartition de l'énergie	27
2.7 Statistiques quantiques	27
2.8 Gaz parfait de Fermi	29
Exercices	33
Corrigés	34

CHAPITRE 3 • STRUCTURE CRISTALLINE	39
3.1 Le cristal idéal	39
3.2 Réseaux cristallins	40
3.3 Diffraction par un réseau cristallin	49
3.4 Défauts cristallins	54
Exercices	56
Corrigés	57
CHAPITRE 4 • BANDES D'ÉNERGIE	59
4.1 Approximations	59
4.2 Méthode des liaisons fortes	62
4.3 Symétries	65
4.4 Approche des liaisons faibles	67
4.5 Propriétés statiques des électrons	71
4.6 Schéma réduit de Brillouin	72
4.7 L'équation centrale	74
4.8 Surface de Fermi	75
4.9 Métaux, isolants, semi-conducteurs	76
4.10 De l'isolant au métal	79
Exercices	81
Corrigés	82
CHAPITRE 5 • DYNAMIQUE DU RÉSEAU	83
5.1 Vibrations du réseau	83
5.2 Phonons	87
5.3 Propriétés thermiques	88
Exercices	92
Corrigés	93
CHAPITRE 6 • SEMI-CONDUCTEURS À L'ÉQUILIBRE	95
6.1 Notion de trou	95
6.2 Gap	96
6.3 Masse effective	98
6.4 Structure des bandes d'énergie	102
6.5 Densité d'états	104
6.6 Densité d'électrons et de trous	105

6.7	Semi-conducteurs intrinsèques	107
6.8	Dopage	108
6.9	Semi-conducteurs extrinsèques	114
	Exercices	116
	Corrigés	117
	CHAPITRE 7 • DYNAMIQUE DES ÉLECTRONS	119
7.1	Dérive dans un champ électrique	120
7.2	Réponse à un champ électrique	123
7.3	Diffusion des porteurs	126
7.4	Potentiel externe et bandes d'énergie	129
7.5	L'effet Hall	129
	Exercices	131
	Corrigés	133
	CHAPITRE 8 • DISPOSITIFS ÉLÉMENTAIRES (I)	137
8.1	La jonction pn	137
8.2	Perturbations dues à la surface	144
8.3	La jonction métal-métal	147
8.4	La jonction métal-semi-conducteur	148
	Exercices	151
	Corrigés	153
	CHAPITRE 9 • DISPOSITIFS ÉLÉMENTAIRES (II)	157
9.1	Le transistor bipolaire	157
9.2	La diode tunnel	161
9.3	Transistors à effet de champ	162
9.4	Structures MIS et MOS	166
9.5	Le transistor MOS	168
9.6	Hétérojonctions	172
	Exercices	174
	Corrigés	175
	CHAPITRE 10 • PROPRIÉTÉS OPTIQUES	177
10.1	Absorption de photons	177
10.2	Émission spontanée de photons	185
10.3	Émission stimulée	187

Exercices	190
Corrigés	191
CHAPITRE 11 • VERS L'ÉCHELLE NANOMÉTRIQUE	193
11.1 Systèmes mésoscopiques	194
11.2 Puits, fils et boîtes quantiques	195
11.3 Densité de niveaux	196
11.4 Puits quantiques	197
11.5 Multipuits quantiques et superréseaux	199
11.6 Transmission résonante sous la barrière	200
11.7 Le blocage de Coulomb	201
11.8 Dispositifs à un électron	204
11.9 Effet Hall quantique	204
11.10 Spintronique	206
11.11 L'électronique moléculaire	208
11.12 La technologie	208
11.13 Conclusion	209
Exercices	210
Corrigés	210
CHAPITRE 12 • DU NANOMONDE AUX APPLICATIONS	211
12.1 La nano-électronique : pourquoi ?	212
12.2 Voir et manipuler l'infiniment petit	215
12.3 Nouvelles formes de carbone	217
12.4 À l'échelle du nanomètre, le monde change	219
12.5 Top-down ou bottom-up ?	221
12.6 La nanomédecine	225
12.7 Nanoparticules et santé	228
12.8 Nano-électronique et libertés individuelles	229
Exercices	230
Corrigés	230
BIBLIOGRAPHIE	233
INDEX	235

Avant-propos

Les dispositifs électroniques à semi-conducteurs ont maintenant une importance économique et stratégique considérable pour le traitement de l'information et de la communication. Ils ont un rôle clef dans la réalisation et le fonctionnement de beaucoup de biens de consommation. Leur importance est née avec la découverte, en 1948, du transistor. Le développement de l'industrie électronique s'est par la suite accéléré avec, dans les années 1970, l'arrivée des circuits intégrés. Le silicium occupe la position dominante parmi les semi-conducteurs et cette situation devrait encore durer longtemps.

Les circuits intégrés concentrent, sur une faible surface, un nombre de plus en plus grand de transistors et leur puissance augmente sans cesse. Ils répondent à une demande du consommateur qui souhaite avoir de plus en plus de confort dans la vie courante en se débarrassant des tâches fastidieuses. Pour cela il faut des dispositifs de traitement de l'information de plus en plus puissants. Une simple carte de crédit contient environ 2 millions de transistors et une automobile actuelle embarque plus d'électronique que les premiers avions Airbus. Les circuits intégrés peuvent être fabriqués simultanément en grand nombre si bien que leur coût de production diminue considérablement alors que leurs performances augmentent. L'industrie micro-électronique est gouvernée par la nécessité de réaliser des composants électroniques (mémoires ou circuits intégrés) toujours plus rapides, plus petits et moins chers.

L'électronique a beaucoup évolué depuis la réalisation du premier transistor. En vingt-cinq ans les performances des microprocesseurs ont été multipliées par 25 000. Sur une surface inférieure à celle du premier transistor, on peut maintenant en mettre plus d'un million. Le prix d'un million de transistors était d'environ 75 000 € en 1973, soit le prix d'une maison. Il est descendu à 6 centimes d'euros en 2000 puis, en 2005, à seulement 0,5 centime d'euro. Alors que le premier microprocesseur d'INTEL, le 4004, contenait 2 300 transistors, le Pentium IV des années 2001 en contenait 55 millions, les premiers centrinos d'INTEL plus de 77 millions et le core duo plus de 150 millions sur une surface de moins de 100 mm². Entre 1964 et la fin des années 1970 le nombre de transistors d'un circuit intégré doublait tous les ans. Depuis cette date, il ne double plus que tous les 18 mois ce qui reste une performance impressionnante. Cette observation,

connue sous le nom de loi de Moore, montre l'extraordinaire vitalité de l'électronique des semi-conducteurs.

L'intégration croissante des composants est en grande partie due à la possibilité de graver des motifs de plus en plus fins dans le silicium. La célèbre série de microprocesseurs 8086 (environ 29 000 transistors), développée par la société INTEL pour les premiers micro-ordinateurs PC, était réalisée avec une technologie dans laquelle on gravait le silicium avec une précision de 4 μm . En 1982, le microprocesseur 80286 était fabriqué avec des règles de dessin de 2 μm . Il fut suivi par les i386DX et i486Dx fabriqués, respectivement, avec une technologie de 1,2 μm et 1 μm . Le Pentium IV basse consommation des années 2000 utilisait une précision de gravure de 0,13 μm . On est aujourd'hui descendu à des finesses de gravure de 65 nm. Les mémoires ont également connu une évolution impressionnante. La première mémoire DRAM (1970) ne faisait que 1 ko mais on atteignait une capacité de 4 ko en 1979. En 2001, on réalisait industriellement des DRAM de 512 ko. On en trouve maintenant qui ont des capacités de plusieurs dizaines de Go et l'on dépasse les 100 Go.

L'objectif de cet ouvrage est de présenter la physique des semi-conducteurs à des physiciens et des chimistes dont le niveau est celui d'un premier cycle universitaire ou équivalent. Il s'agit d'un cours d'initiation pour tous ceux qui veulent acquérir rapidement des bases élémentaires dans ce domaine. Il pourra être complété par la lecture d'ouvrages plus complets dont certains sont cités dans la bibliographie.

Les composants de l'électronique moderne sont, pour la grande majorité d'entre eux, réalisés à partir de semi-conducteurs cristallins. Leur fonctionnement est basé sur des phénomènes de la physique quantique et statistique. Ces sujets sont rappelés dans les deux premiers chapitres. Le troisième introduit la physique des cristaux, le chapitre 4 montre que l'arrangement périodique des atomes dans un cristal conduit à des bandes d'énergie qui gouvernent ses propriétés électriques et le chapitre 5 étudie les vibrations des atomes du cristal. Les propriétés électriques des semi-conducteurs sont gouvernées par celles des électrons les moins liés de l'édifice cristallin. Leurs propriétés statiques et dynamiques sont respectivement étudiées dans les chapitres 6 et 7. Les chapitres 8 et 9 abordent, de manière qualitative, la physique des composants électroniques élémentaires. Le chapitre 10 est consacré à l'interaction des électrons et des photons qui est à la base des composants optroniques. Le chapitre 11 introduit le domaine des systèmes de dimensions nanométriques qui préparent l'électronique du futur. En effet, l'évolution de l'industrie micro-électronique rencontre des défis technologiques et physiques nouveaux lorsque l'on descend à des dimensions inférieures à quelques dizaines de nanomètres. Elle devra les résoudre pour continuer à se développer mais elle pourrait aussi être ralentie avant pour des raisons économiques si les investissements deviennent trop grands pour être rentabilisés. Le dernier chapitre aborde le problème des nanotechnologies, des nanosystèmes et de la nano-électronique en essayant de réfléchir sur les applications futures, sur les enjeux ainsi que sur les

impacts que peuvent avoir ces technologies sur la société. À la fin de chacun des chapitres, des exercices corrigés sont proposés.

L'un d'entre-nous (C.N.) souhaite remercier le Laboratoire d'Electronique de Technologie et d'Instrumentation (LETI) du Commissariat à l'Energie Atomique (CEA) pour lui avoir fait découvrir le domaine passionnant de l'électronique moderne et de ses technologies. Il a bénéficié, au cours de quelques années passées au LETI, d'enrichissantes discussions avec de nombreux collègues qui sont vivement remerciés ici.

• **Notations** : les vecteurs sont notés à l'aide de caractères gras. Par exemple, \mathbf{A} est un vecteur de composantes (A_x , A_y et A_z). Toutefois, pour ne pas confondre le vecteur champ électrique et l'énergie, nous noterons ce vecteur avec une flèche (\vec{E}).

Rappels utiles

Constantes physiques

Charge de l'électron	$-e = -1,602\ 19 \times 10^{-19}\ \text{C}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,380\ 664 \times 10^{-23}\ \text{J/K}$
Constante de Planck	$\begin{cases} h = 6,626\ 18 \times 10^{-34}\ \text{Js} \\ \hbar = h/2\pi = 1,054\ 590 \times 10^{-34}\ \text{Js} \end{cases}$
Constante de structure fine	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137,0360$
Constante de Rydberg	$R_\infty = 1,097\ 373\ 20 \times 10^7\ \text{m}^{-1}$
Constante des gaz parfaits	$R = \mathcal{N}k_B = 8,314\ 41\ \text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$
Masse de l'électron	$m = 9,109\ 54 \times 10^{-31}\ \text{kg}$
Masse du neutron	$m_n = 1,674\ 95 \times 10^{-27}\ \text{kg}$
Masse du proton	$m_p = 1,672\ 65 \times 10^{-27}\ \text{kg}$
Nombre d'Avogadro	$\mathcal{N} = 6,022\ 05 \times 10^{23}$
Perméabilité du vide	$\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2 = 4\pi 10^{-7}\ \text{Hm}^{-1}$
Permittivité du vide	$\begin{cases} \epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12}\ \text{Fm} \\ 1/(4\pi\epsilon_0) = 8,988 \times 10^9\ \text{Nm}^2\text{C}^{-2} \end{cases}$
Rayon de Bohr	$a_1 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2) = 52,9177\ \text{pm}$
Vitesse de la lumière dans le vide	$c = 2,997\ 924\ 58 \times 10^8\ \text{m/s}$

Préfixes

deca	→	10^1	symbole	da	deci	→	10^{-1}	symbole	d
hecto	→	10^2	symbole	h	centi	→	10^{-2}	symbole	c
kilo	→	10^3	symbole	k	milli	→	10^{-3}	symbole	m
mega	→	10^6	symbole	M	micro	→	10^{-6}	symbole	μ
giga	→	10^9	symbole	G	nano	→	10^{-9}	symbole	n
tera	→	10^{12}	symbole	T	pico	→	10^{-12}	symbole	p
pecta	→	10^{15}	symbole	P	femto	→	10^{-15}	symbole	f
exa	→	10^{18}	symbole	E	atto	→	10^{-18}	symbole	a

Unités particulières

$$1\ \text{\AA} = 10^{-10}\ \text{m} \quad 1\ \text{fermi} = 1\ \text{fm} = 10^{-15}\ \text{m} \quad 1\ \text{eV} = 1,602190 \times 10^{-19}\ \text{J}$$

$$1\ \text{cal} = 4,1855\ \text{J} \text{ et } 1\ \text{Cal} = 1\ \text{kcal} = 1\ 000\ \text{cal}$$

Conversions

$$E = h\nu, \lambda = c/\nu, \sigma = 1/\lambda, E = k_B T$$

$$1\ \text{eV} \rightarrow 8\ 065,48\ \text{cm}^{-1} \rightarrow 2,417971 \times 10^{14}\ \text{Hz} \rightarrow 1\ 239,852\ \text{nm} \rightarrow 11\ 604,5\ \text{K}$$

$$1\ \text{eV} = 23\ 045\ \text{kcal/mol}$$

Chapitre 1

Physique quantique

La matière est composée d'atomes ou de molécules qui obéissent à des lois physiques souvent différentes de celles auxquelles nous sommes accoutumés dans le monde macroscopique. Cela ne veut pas dire que les lois fondamentales de la physique ne sont pas les mêmes pour les atomes et pour les objets macroscopiques. En effet, certains effets de ces lois physiques peuvent apparaître prépondérants à une échelle alors qu'ils ont peu d'importance à l'autre. On s'est ainsi aperçu, au début du vingtième siècle, que la mécanique classique, qui avait été développée pour décrire le mouvement d'objets macroscopiques, était incapable de décrire de manière satisfaisante certains phénomènes comme le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique ou l'effet Compton. Il a fallu pour cela introduire une nouvelle théorie, la *mécanique quantique*, pour comprendre et expliquer le comportement d'objets microscopiques comme les atomes, les molécules ou les noyaux ainsi que leurs assemblages en entités plus complexes. La mécanique classique, qui permet de très bien décrire l'évolution des objets macroscopiques comme les planètes ou la chute des corps, en est une limite, lorsque certaines conditions sont satisfaites¹.

Un phénomène est qualifié de *quantique* s'il ne peut être expliqué que par la mécanique quantique. Il est qualifié de *classique* s'il peut être expliqué dans le cadre d'une théorie classique (mécanique, hydrodynamique, électromagnétisme, *etc.*). Bien que les phénomènes classiques puissent aussi être interprétés dans le cadre d'une théorie quantique, on ne les qualifie jamais, dans la pratique, de phénomènes quantiques. Nous nous conformerons à cet usage et appellerons *effet quantique* tout phénomène

1. Nous renvoyons le lecteur à nos ouvrages de *Physique quantique* et *Physique statistique*, édités chez Dunod, pour une introduction à ces sujets. Dans la suite, nous nous référerons à ces livres en utilisant les sigles MQ et PS, respectivement.

ne pouvant pas être interprété dans un cadre dit classique. Ainsi, selon les conditions, une particule pourra avoir un comportement classique ou quantique.

1.1 DUALITÉ ONDE-CORPUSCULE

La physique classique distingue les *particules*, qui correspondent à une densité d'énergie localisée dans l'espace, et les *ondes* qui correspondent à une délocalisation de l'énergie. Nous appellerons *corpuscules* les objets qui se comportent comme des particules classiques et utiliserons le terme de *particule* pour un objet qui peut être soit un corpuscule soit une onde.

Les corpuscules obéissent aux équations de la mécanique classique. Les ondes obéissent à des équations aux dérivées partielles avec des conditions aux limites qui dépendent du problème considéré. On obtient alors des solutions où toutes les énergies ne sont pas permises. Ainsi, le pincement d'une corde de guitare ne donne pas un spectre continu de fréquences.

L'évolution des corpuscules dans une théorie classique est *déterministe*. Si l'on connaît l'état d'un système à un temps t_0 , ainsi que les caractéristiques des interactions, on peut, en principe, calculer l'état du système à un temps t ultérieur et définir la notion de *trajectoire*.

Les ondes se comportent parfois, lors de l'interaction avec la matière, comme des corpuscules. De même, des corpuscules se comportent, dans certaines conditions, comme des ondes. Ainsi, l'effet photoélectrique et l'effet Compton sont une manifestation de cet aspect corpusculaire de la lumière. D'autre part, le comportement ondulatoire des corpuscules est observé lors de la diffraction d'électrons, de neutrons, *etc.* sur des cristaux.

De nombreuses expériences montrent la nature ambivalente de la matière et du rayonnement. Les ondes électromagnétiques peuvent se comporter, lors de l'interaction avec la matière, comme des corpuscules (effet Compton), les corpuscules peuvent se comporter comme des ondes (diffraction des électrons). Cette dualité onde-corpuscule existe toujours au niveau microscopique. On peut observer l'un ou l'autre de ces deux aspects mais jamais les deux en même temps. La mécanique quantique résout cette apparente contradiction en disant qu'une particule n'est ni une onde ni un corpuscule mais qu'elle peut avoir l'un ou l'autre de ces comportements selon les conditions dans lesquelles elle se trouve.

Pour décrire un système classique, il suffit de connaître ses variables dynamiques : les positions et les vitesses de chaque particule le constituant. Si des charges électriques interviennent, il faut, en outre, connaître le champ électrique et le champ magnétique en tout point de l'espace. Les grandeurs physiques que l'on peut mesurer sont fonctions des quantités précédentes et le calcul différentiel et intégral est le cadre mathématique parfait pour élaborer les théories correspondantes.

Les systèmes quantiques ne peuvent pas être décrits ainsi. La notion de trajectoire doit être abandonnée au profit de celle de *fonction d'onde* qui contient *toute* l'information sur le système. Les quantités physiques ne sont plus représentées par des fonctions, comme dans les théories classiques, mais par des opérateurs mathématiques et la notion de mesure prend une importance particulière. En effet, le résultat d'une mesure ne peut être qu'une valeur propre associée à ces opérateurs.

1.2 RELATION DE DE BROGLIE

On peut associer à chaque particule une onde dont la longueur d'onde, λ , est donnée par la formule de de Broglie :

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{ou} \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.1)$$

où p est le module de l'impulsion \mathbf{p} . La quantité \mathbf{k} est le vecteur d'onde et h la constante de Planck. En physique quantique on utilise $\hbar = h/2\pi$ plutôt que la constante de Planck. La fréquence de l'onde de matière associée à la particule, ν , ainsi que sa pulsation ω , sont reliées à l'énergie de la particule E , par la relation :

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

Insistons bien sur le fait que E est l'*énergie totale* de la particule ; elle inclut son énergie de masse au repos. C'est donc la somme de l'énergie cinétique (T) de la particule et de son énergie de masse au repos (m_0c^2 , où m_0 est la masse au repos et c la vitesse de la lumière ; on a, par exemple $m_0c^2 = 511$ keV pour l'électron). En mécanique relativiste, la relation entre l'énergie totale et l'impulsion est donnée par la relation :

$$E^2 = p^2c^2 + m_0c^4$$

Celle-ci donne, dans la limite classique où la vitesse $v \ll c$, la relation bien connue entre l'énergie cinétique et l'impulsion : $T = p^2/2m_0$. Pour un photon, pour lequel $m_0 = 0$, on a $p = E/c$. Les relations de de Broglie conduisent ainsi aux relations connues en électromagnétisme :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \quad \text{pour les photons.}$$

Il faut garder en mémoire que la relation $\lambda = c/\nu$ n'est pas valable pour une particule dont la masse au repos n'est pas nulle.

La longueur d'onde associée à une particule est un paramètre important pour savoir si celle-ci se comporte comme un corpuscule ou comme une onde. En effet, lorsque la longueur d'onde est grande, ou du même ordre de grandeur que les dimensions caractéristiques du problème que l'on étudie, la particule se comporte comme une onde. Si,

au contraire, comme c'est le cas pour un objet classique, elle est très petite devant ces dimensions caractéristiques, la particule se comporte toujours comme un corpuscule. Une particule ne peut se comporter comme un corpuscule *et* comme une onde. La question est, bien sûr, d'évaluer convenablement les dimensions caractéristiques du système.

Pour résumer, on peut dire que l'aspect corpusculaire, que l'on observe lorsque la longueur d'onde associée à la particule est petite comparée à ses dimensions ou aux dimensions de l'instrument de mesure, est très bien décrit dans le cadre de la mécanique classique non relativiste (sauf si la vitesse de la particule est proche de celle de la lumière). L'aspect ondulatoire se manifeste lorsque la longueur d'onde associée à la particule n'est plus négligeable comparée aux dimensions caractéristiques du problème.

1.3 POSTULATS

Toute théorie est construite à partir de postulats dont la validité dépend du bon accord avec l'expérience. La validité de la mécanique quantique a été vérifiée dans de nombreuses expériences et par ses effets directs ou indirects.

La description classique d'une particule se fait en termes des coordonnées de sa position et de sa vitesse. En mécanique quantique, il faut substituer à ces notions celle de *fonction d'onde* et d'*opérateurs*. La fonction d'onde contient toute l'information sur la particule, les opérateurs sont eux associés aux mesures que l'on peut faire sur celle-ci. Les six variables qui caractérisent l'état d'une particule classique (position et vitesse) sont remplacées par une seule fonction dont il faut connaître la valeur en tout point de l'espace. Les quantités physiques de la mécanique classique, fonctions des variables dynamiques (positions et impulsions), sont remplacées par des opérateurs hermitiques.

1.3.1 Postulat 1

Le premier postulat dit que l'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la connaissance de son vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$. Ce vecteur est défini dans l'espace de Hilbert qui caractérise le problème. Pour résoudre un problème de façon quantitative, il faut définir un référentiel et utiliser les composantes du vecteur d'état dans celui-ci. Celles-ci peuvent prendre des valeurs différentes selon le choix des vecteurs de base et l'on appelle cela une *représentation*. Plusieurs sont possibles et l'on choisit habituellement celle qui est la plus commode pour résoudre le problème posé. L'une d'entre-elles est particulièrement utilisée, c'est la *représentation coordonnées*. Cette représentation constitue la *mécanique ondulatoire* et $|\psi(t)\rangle$ devient, dans cette représentation, une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ qui dépend de la position \mathbf{r} et du temps t .

1.3.2 Postulat 2

La mesure fait le lien entre l'observateur et le système. À la différence de la mécanique classique, toute mesure sur un système quantique perturbe celui-ci de manière incontrôlée. Le deuxième postulat associe à toute grandeur physique \mathcal{A} un opérateur hermitique \hat{A} , appelé *observable*. Le résultat d'une mesure de \mathcal{A} ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur \hat{A} . Immédiatement après la mesure $|\psi(t)\rangle$, le vecteur d'état du système, est modifié : il est réduit à sa projection sur le sous-espace propre associé à la valeur propre mesurée.

Comme le résultat d'une mesure est toujours un nombre réel, l'opérateur \hat{A} , qui représente la quantité physique \mathcal{A} , est hermitique car les valeurs propres d'un tel opérateur sont toujours réelles.

1.3.3 Postulat 3

Le troisième postulat dit que l'évolution au cours du temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.2)$$

où \hat{H} est l'opérateur hamiltonien (correspondant à l'énergie) du système. Cette équation étant linéaire, la combinaison linéaire de deux solutions est aussi une solution : c'est le *principe de superposition*.

1.3.4 Postulat 4

Le hamiltonien classique est l'énergie du système exprimée en fonction des coordonnées et des impulsions des particules qui le compose. Le quatrième postulat indique comment construire \hat{H} ainsi que les opérateurs quantiques. Les opérateurs \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} sont obtenus par la substitution $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$ et les opérateurs \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z par $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$, $\hat{p}_y = -i\hbar \partial/\partial y$ et $\hat{p}_z = -i\hbar \partial/\partial z$.

En représentation coordonnées, le hamiltonien d'une particule de masse m plongée dans un potentiel $V(\mathbf{r}) = V(x, y, z)$ est obtenue à partir de l'expression classique $H = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$. On obtient, en utilisant le postulat 4 :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \quad (1.3)$$

où $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ est le laplacien en coordonnées cartésiennes. La représentation coordonnées de l'équation de Schrödinger dépendant du temps s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4)$$

La quantité $\psi(\mathbf{r}, t)$ est une fonction complexe. Pour certaines valeurs du temps t , elle peut être réelle ou imaginaire pure. La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$ contient toute l'information sur le système. Elle permet d'en calculer toutes les propriétés, notamment l'énergie, et se substitue à la connaissance des variables \mathbf{r} et \mathbf{p} de la mécanique classique. Le carré du module de la fonction d'onde, $|\psi|^2 = \psi^* \psi$, est proportionnel à la densité de probabilité de présence de la particule au point \mathbf{r} .

1.4 ÉTATS STATIONNAIRES

L'énergie totale, E , joue un rôle particulier en mécanique classique et en mécanique quantique². En effet, c'est une constante du mouvement pour un système isolé. Si le système est stable et isolé, elle reste constante. On dit alors que le système est dans un *état stationnaire*. Dans ce cas E est une valeur propre du hamiltonien et l'on doit avoir, puisque $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ est l'opérateur associé à l'énergie :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = E\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

Lorsque l'énergie E est constante, on obtient $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, 0) \exp(-iEt/\hbar)$ qui donne $\psi(\mathbf{r}, t)$ en fonction de la fonction d'onde initiale $\psi(\mathbf{r}, 0) \equiv \psi(\mathbf{r})$. Si nous reportons cette solution dans (1.4), on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

Cette équation différentielle est appelée *équation de Schrödinger indépendante du temps* (on l'appelle aussi souvent, par abus de langage, équation de Schrödinger tout court). Sa résolution donne la fonction d'onde au temps $t = 0$ et les niveaux d'énergie. Pour une particule dans un puits de potentiel, il n'existe des solutions que pour certaines valeurs de l'énergie : elle est *quantifiée*.

1.5 MESURES SIMULTANÉES D'OBSERVABLES

Abordons maintenant le problème important de la mesure simultanée de deux quantités physiques \mathcal{A} et \mathcal{B} auxquelles sont associées les observables \hat{A} et \hat{B} . Contrairement à la mécanique classique, on ne peut pas mesurer simultanément ces deux quantités avec toute la précision possible.

En effet, après la mesure, le système doit être dans l'état propre associé à la valeur propre qui est le résultat de la mesure. Pour deux mesures simultanées, il doit donc

2. Nous supposons ici le système non relativiste. L'énergie totale est alors définie comme la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle.