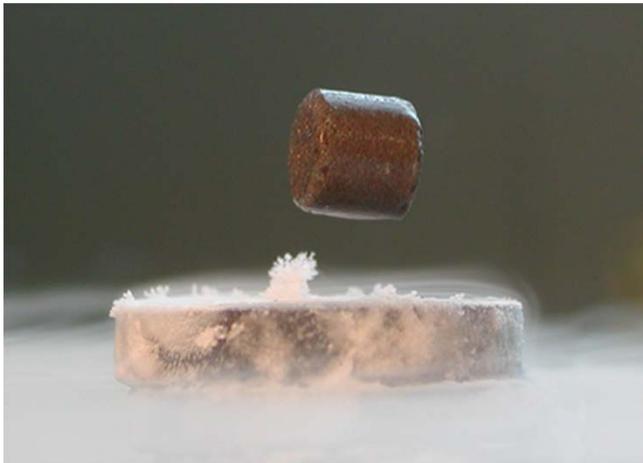


# Les matériaux quantiques et l'ingénierie



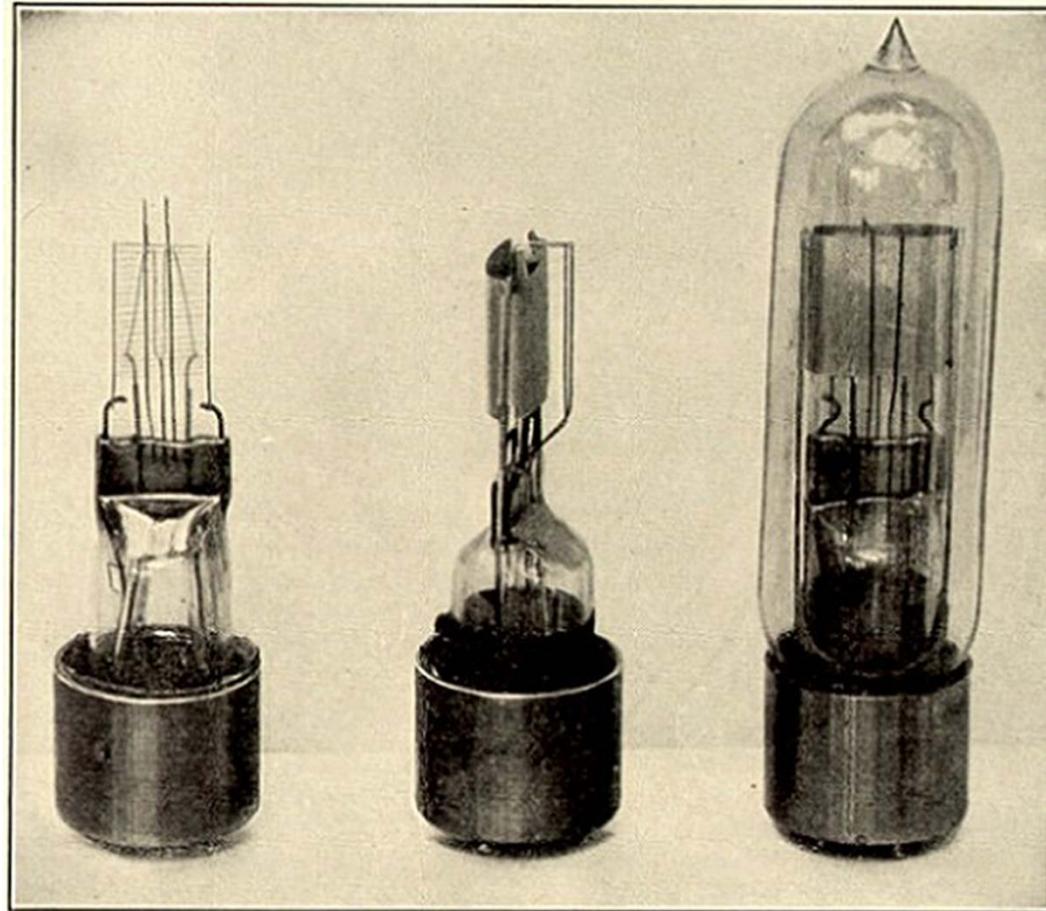
A.-M. Tremblay

3IT

19 octobre 2016



# Avant: les lampes à vide



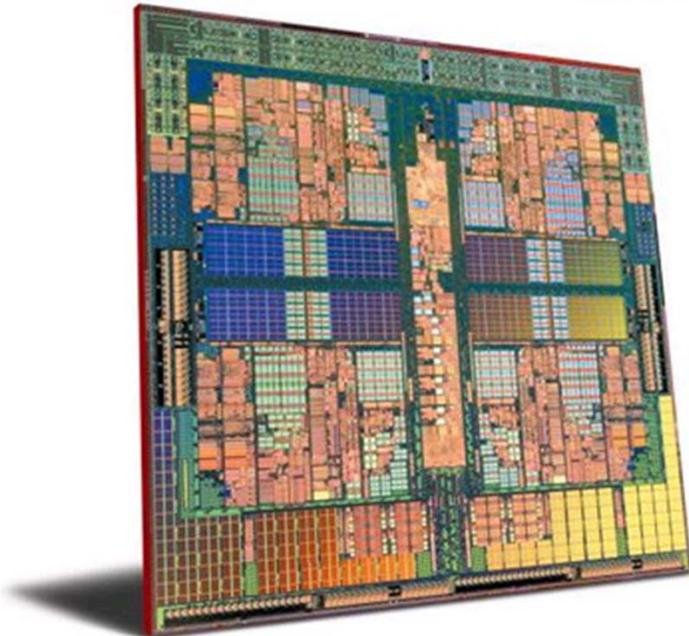
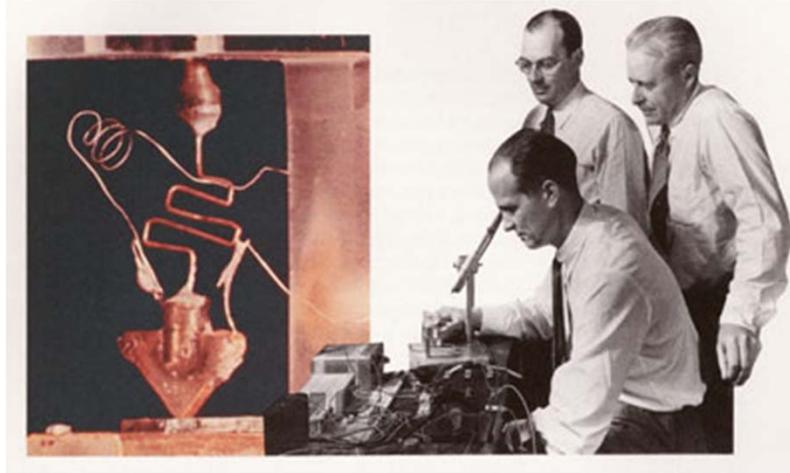
*Courtesy of the Radio Corporation of America.*

THE THREE ELEMENT VACUUM TUBE WHICH IS CHIEFLY RESPONSIBLE FOR THE RAPID DEVELOPMENT OF RADIO COMMUNICATION. THE FIRST VIEW ON THE LEFT SHOWS THE FILAMENT SURROUNDED BY THE GRID. IN THE CENTER VIEW THE PLATE HAS BEEN ADDED AND ON THE RIGHT IS THE COMPLETE TUBE.



# Le transistor

1947

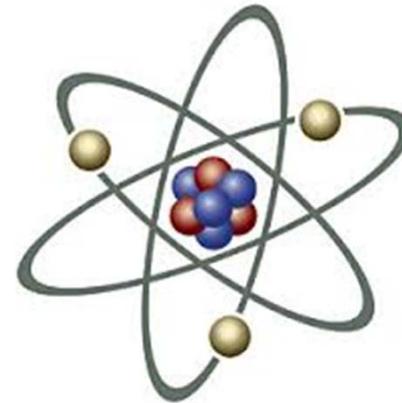


# Les retombées...



ww  
hys

# Comment est-on arrivé là?



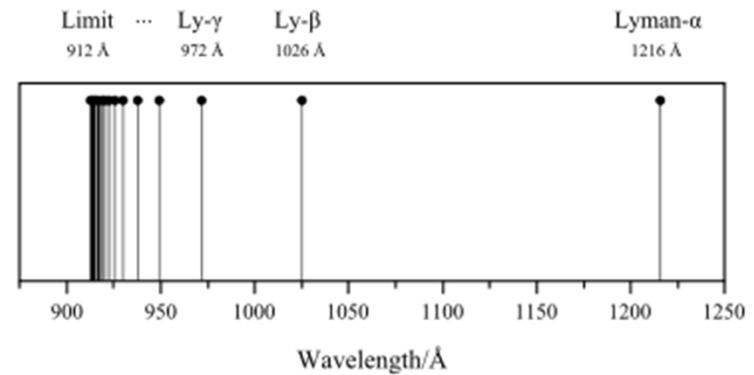
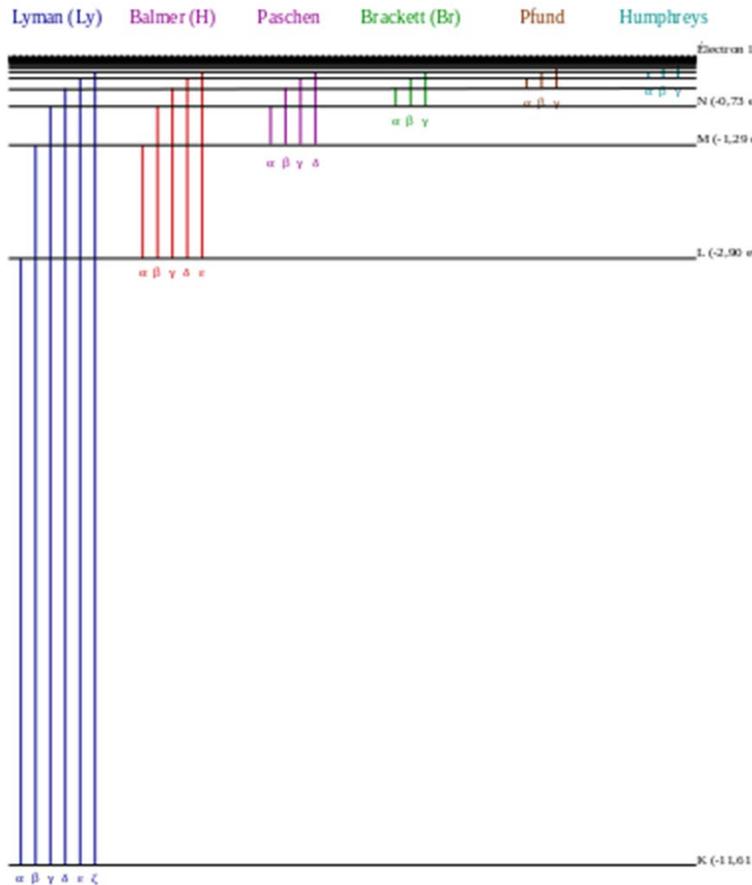
# Effet photoélectrique

$$E = h\nu$$



# Radiation et stabilité de la matière

Balmer (Visible)



Lyman (UV)

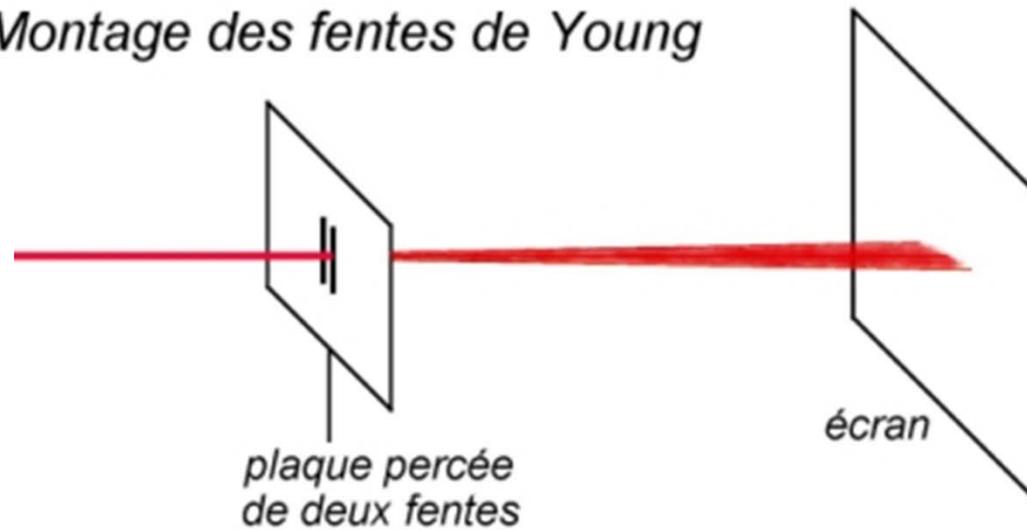
Source: Wikipedia



UNIVERSITÉ DE  
SHERBROOKE

# État stationnaire: pas de trajectoire

Montage des fentes de Young



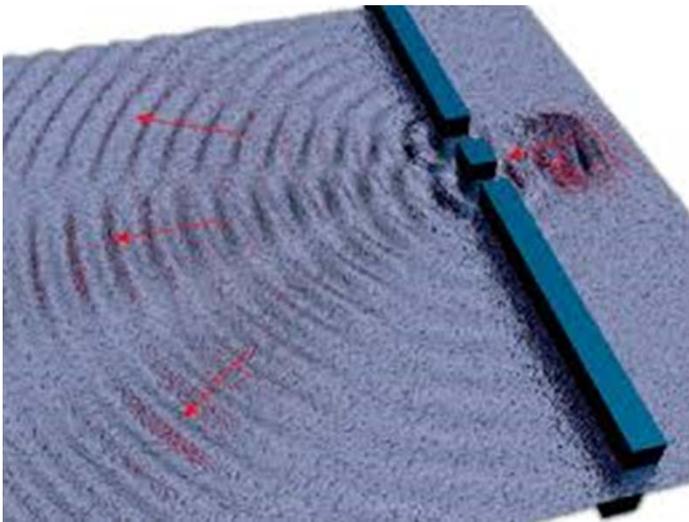
[www.maxicours.com](http://www.maxicours.com)

Espacement 0,5mm  
Largeur 0,08mm



UNIVERSITÉ DE  
SHERBROOKE

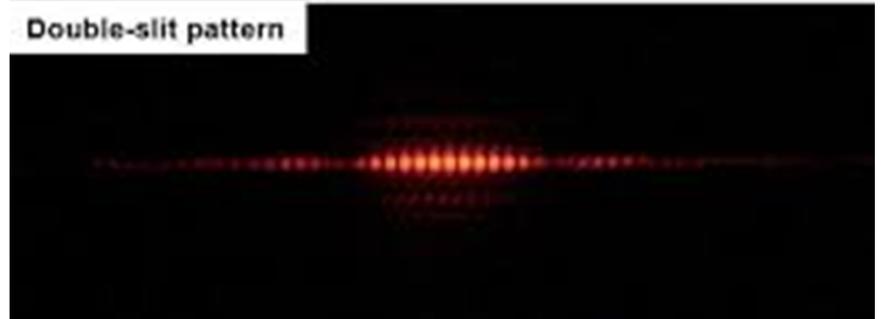
# Onde



Single-slit pattern



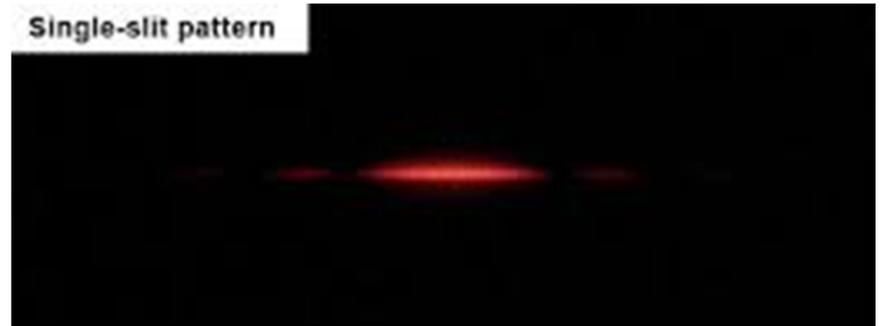
Double-slit pattern



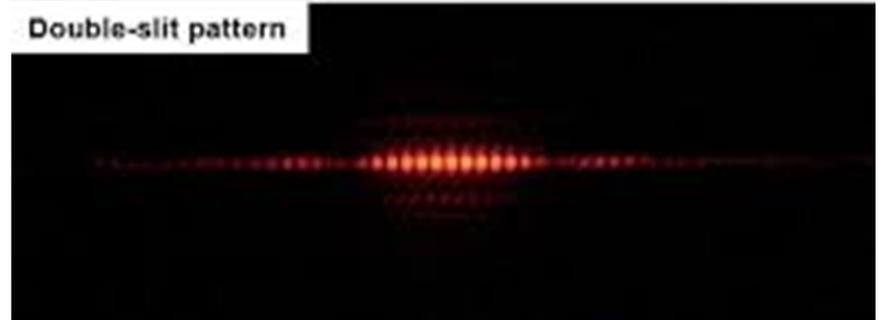
# Le photon: une particule



Single-slit pattern



Double-slit pattern



# À deux endroits à la fois: superposition

$$\Psi_T = \Psi_G + \Psi_D$$

$$\text{Probabilité} = \Psi_T^* \Psi_T$$

$$\Psi_T^* \Psi_T = \Psi_G^* \Psi_G + (\Psi_D^* \Psi_G + \Psi_G^* \Psi_D) + \Psi_D^* \Psi_D$$

Interférence



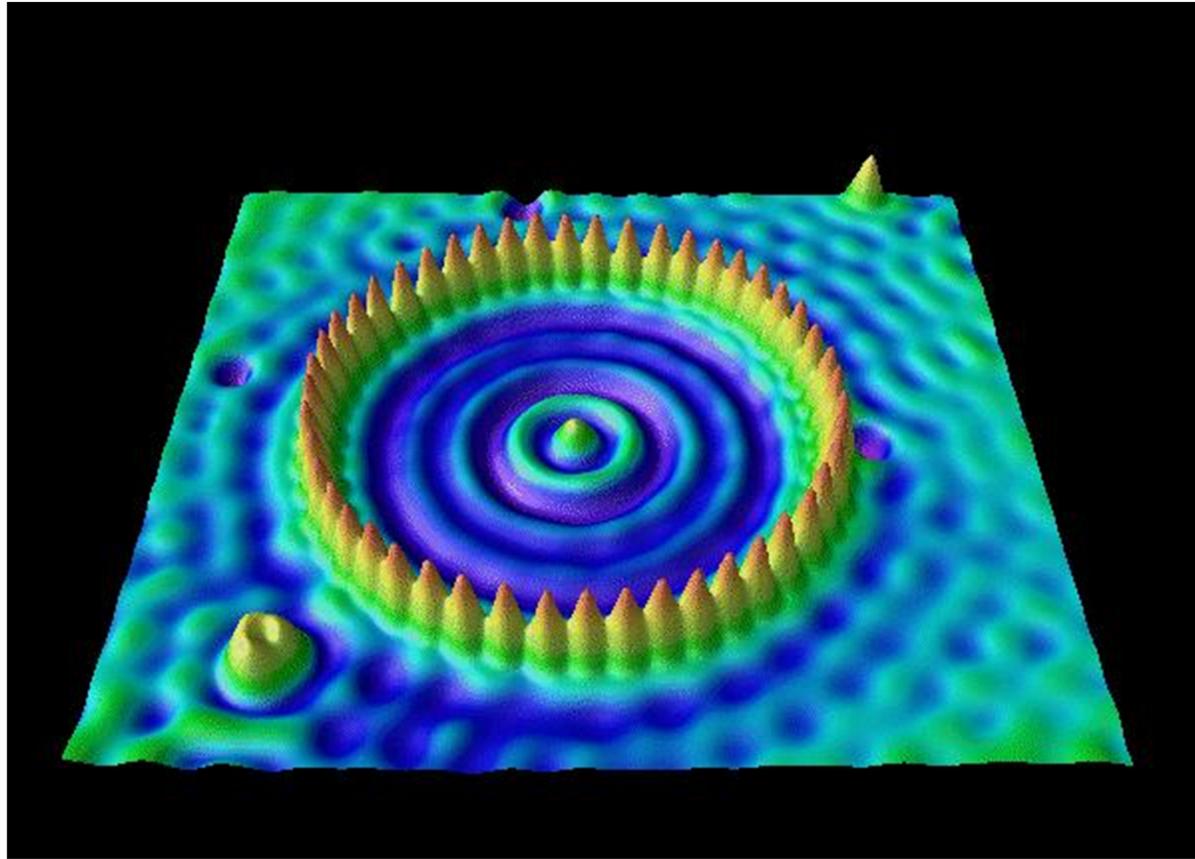
# Dualité onde-particule

$$\lambda = h/p$$

$$T_{osc} = h/E$$



# On peut « Voir » les atomes



Swiss Nanoscience Institute, Basel,  
Switzerland

Fe sur Cu: 7 nm Eigler *et al.* 1993



UNIVERSITÉ DE  
SHERBROOKE

# État stationnaire

- État propre de l'énergie

$$\Delta p \Delta x > h$$

$$\Delta E \Delta t > h$$



## Où on retrouve le dipôle

$$P = \frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{4\pi\epsilon_0 c^3} |\langle \psi_0 | \mathbf{D} | \psi_1 \rangle|^2$$



## Où on retrouve le dipôle

$$P = \frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{4\pi\epsilon_0 c^3} |\langle \psi_0 | \mathbf{D} | \psi_1 \rangle|^2$$

$$\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | \langle \psi_0 | e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} | \psi_1 \rangle | n_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \psi_0 | e\mathbf{r} | \psi_1 \rangle \cdot \langle n_{\mathbf{k}} + 1 | \mathbf{E} | n_{\mathbf{k}} \rangle$$

$$\langle n_{\mathbf{k}} | \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} | n_{\mathbf{k}} \rangle \propto n_{\mathbf{k}} h\nu$$

$$\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | \mathbf{E} | n_{\mathbf{k}} \rangle \propto \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}$$



# Le laser

$$\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | \mathbf{E} | n_{\mathbf{k}} \rangle \propto \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}$$

$$\langle n_{\mathbf{k}} | \mathbf{E} | n_{\mathbf{k}} \rangle = 0$$

État cohérent:

$$\langle \alpha | \mathbf{E} | \alpha \rangle \neq 0$$

$$|\alpha\rangle = C_0|0\rangle + e^{i\omega t} C_1|1\rangle + e^{2i\omega t} C_2|2\rangle + \dots$$



# Bizarre

- Einstein: En 1912, il écrit à un de ses amis à ce sujet : « Récemment, j'ai formulé une théorie sur la théorie quantique des solides. Théorie est un mot trop présomptueux – ce n'est qu'un tâtonnement sans fondement solide. Plus la théorie quantique remporte de succès, plus elle apparaît sotte



# La théorie la plus précise

- Expérience      Phys. Rev. Lett. 97, 030801 (2006)

$$g/2 = \mathbf{1.001\ 159\ 652\ 188\ 4} (4.3)$$

- Calcul              Phys. Rev. D 77, 053012 (2008)

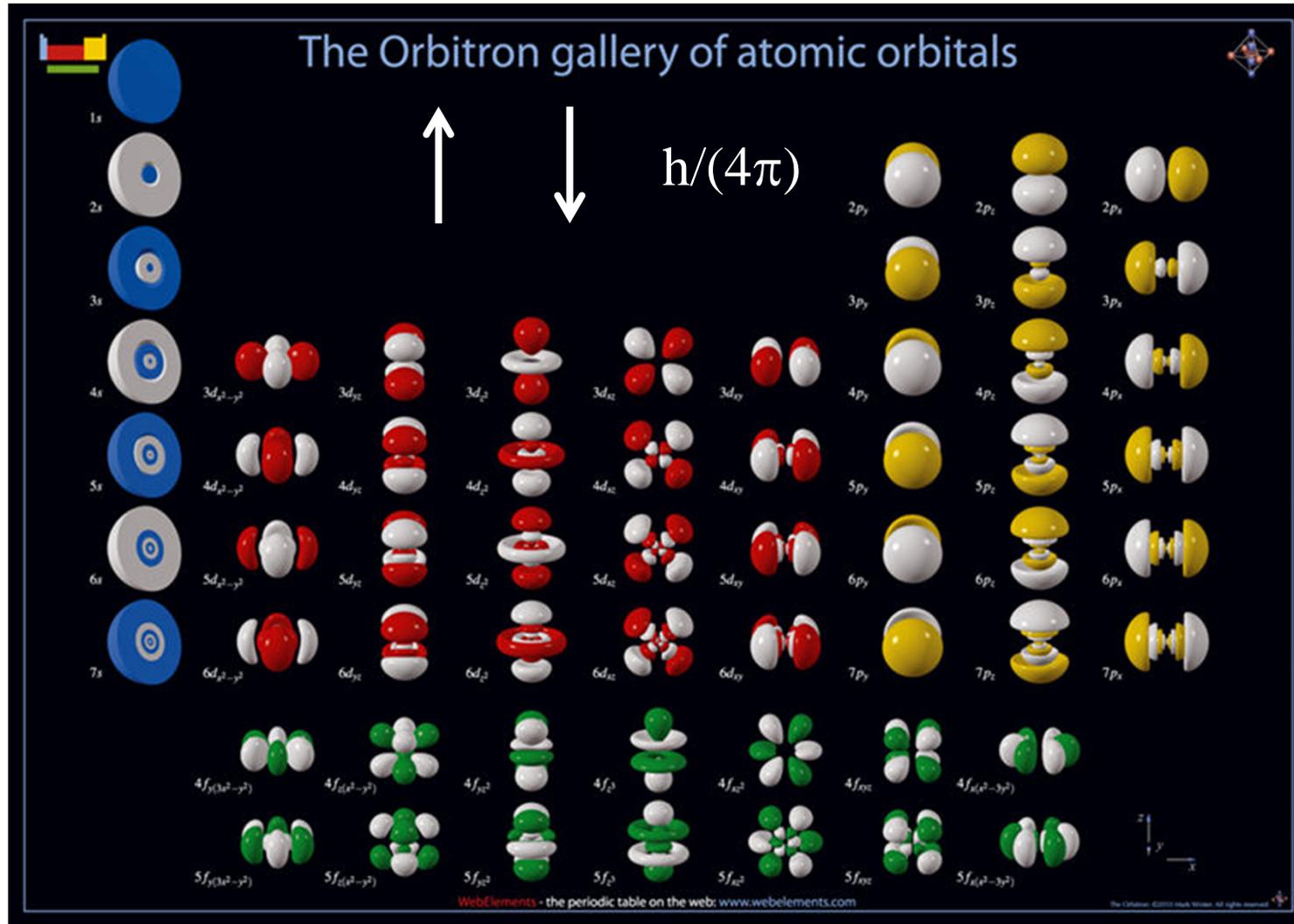
$$g/2 = \mathbf{1.001\ 159\ 652\ 182\ 79} (10)$$



# Plus qu'un électron: le tableau périodique



# Orbitales atomiques et tableau périodique



# Électrons dans les solides

## Charge positive?

La diode

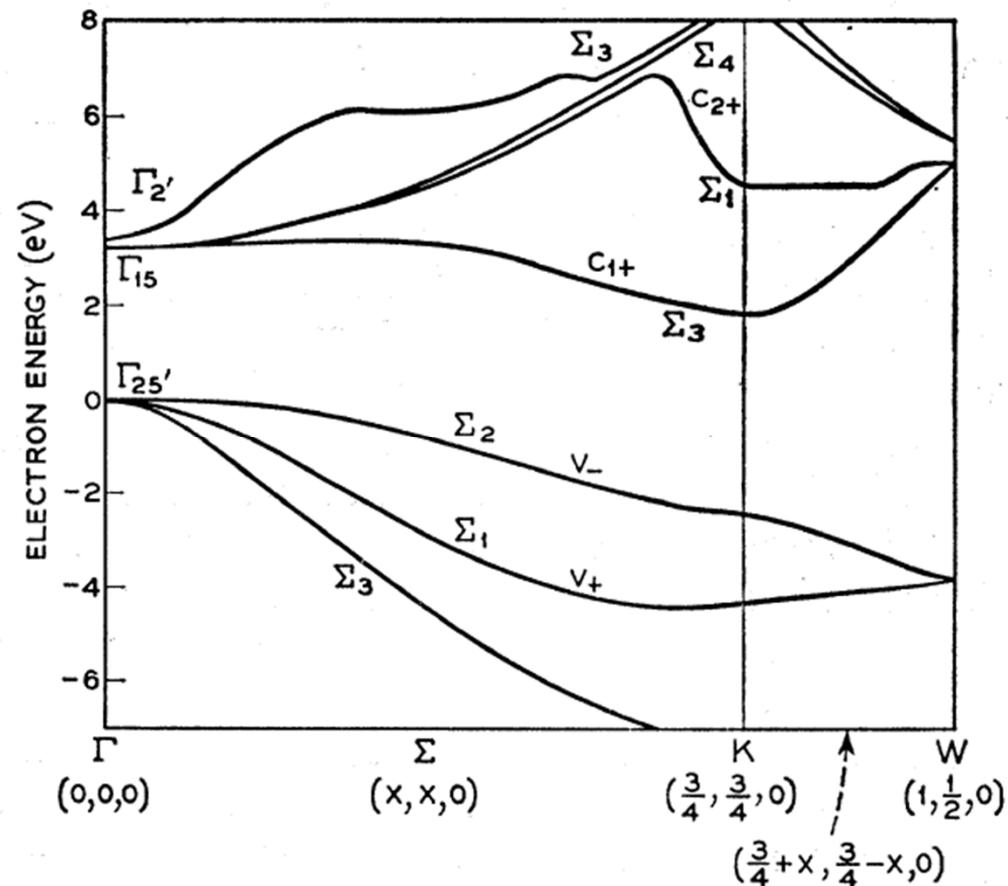
Le transistor



# Structure électronique



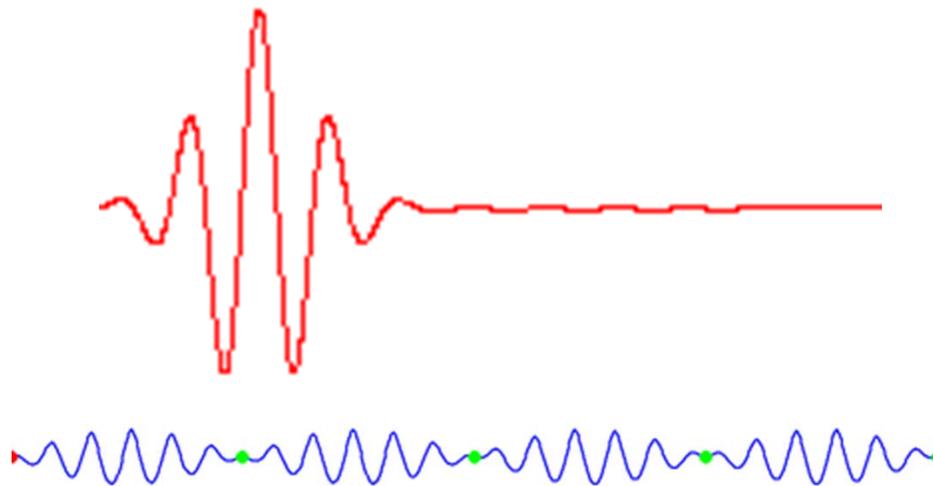
# Énergie en fonction de $k = 2\pi/\lambda$



E. O. Kane  
Phys. Rev. 146, 558 (1966)



# Vitesse de groupe et vitesse de phase



[https://fr.wikiversity.org/wiki/Dispersion\\_des\\_ondes/Paquets\\_d%27ondes](https://fr.wikiversity.org/wiki/Dispersion_des_ondes/Paquets_d%27ondes)



# Vitesse de groupe et vitesse de phase

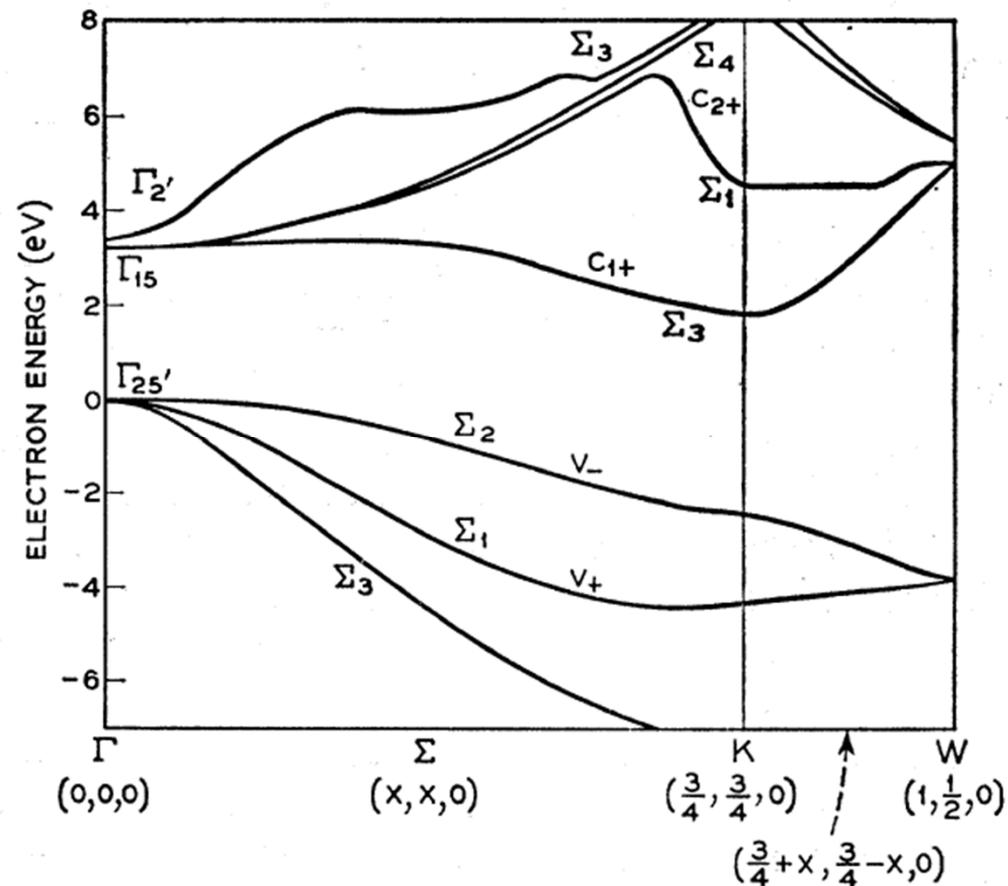
$$V_g^x = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E}$$

$$\frac{dV_g^x}{dt} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x^2} \frac{dp_x}{dt} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x^2} qE_x$$



# Énergie en fonction de $k = 2\pi/\lambda$



E. O. Kane  
Phys. Rev. 146, 558 (1966)



# Vitesse de groupe et vitesse de phase

$$e^{2\pi i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\varepsilon(\mathbf{p})t)/h}$$

$$e^{2\pi i(\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}-\varepsilon(\mathbf{p}_0)t)/h} \int d^3 p e^{2\pi i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)\cdot(\mathbf{r}-\nabla\varepsilon(\mathbf{p}_0)t)/h}$$

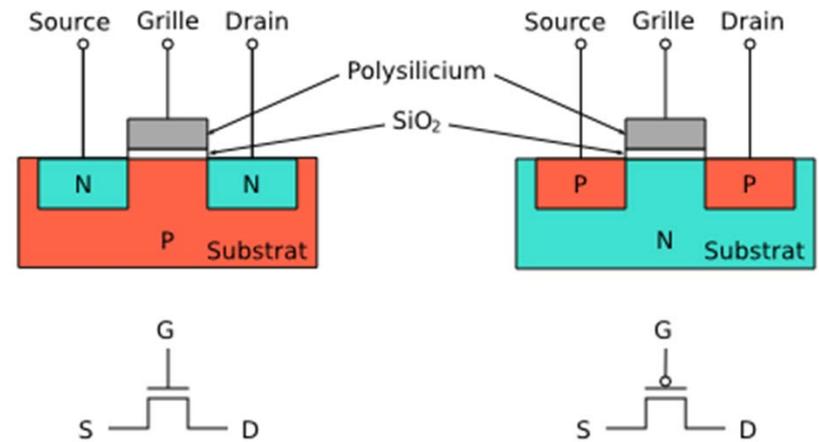
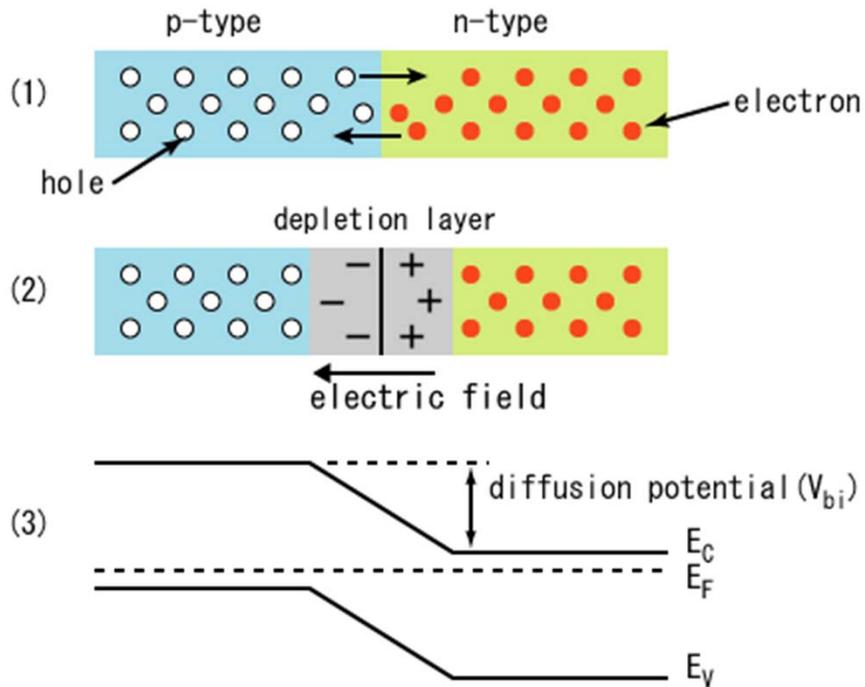
$$V_g^x = \frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E}$$

$$\frac{dV_g^x}{dt} = \frac{\partial^2\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x^2} \frac{dp_x}{dt} = \frac{\partial^2\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x^2} qE_x$$



# La diode à l'état solide



[www.liafa.jussieu.fr](http://www.liafa.jussieu.fr)

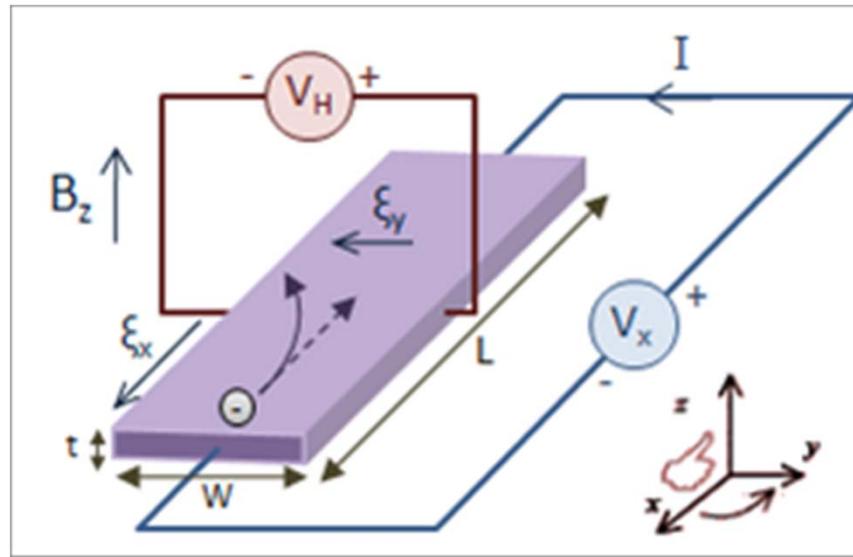


# Topologie (Ion Garate)

Étalon pour l'Ohm  
Spintronique



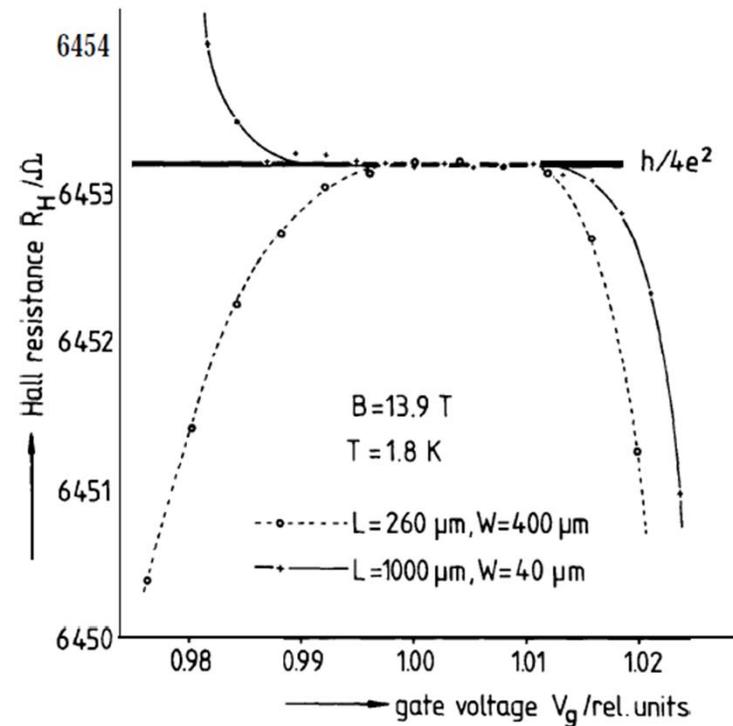
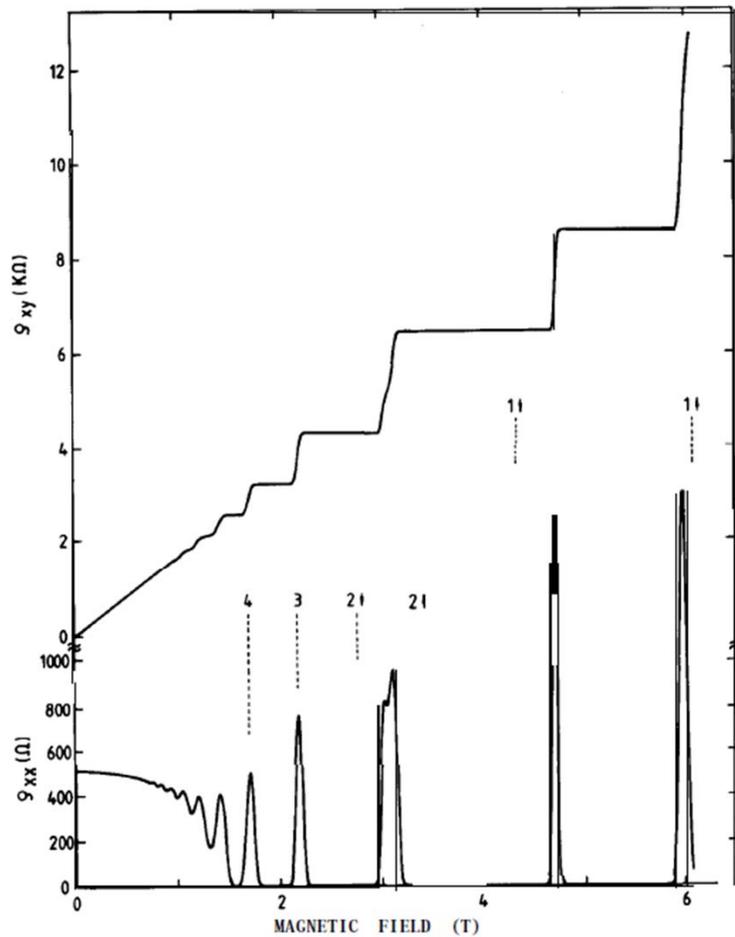
# Effet Hall



Public Domain, <https://en.wikipedia.org/w/index.php?curid=22918777>



# Étalon de résistance (Nobel 1985)



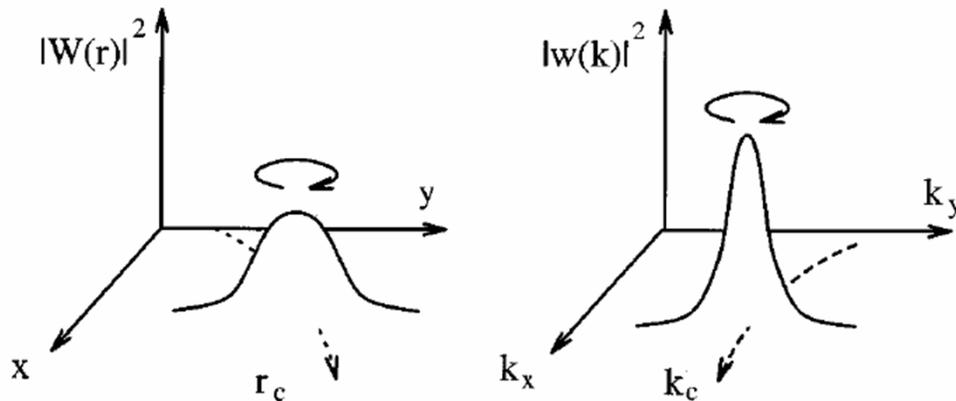
$$\frac{h}{e^2} = 25\,812.807\,572 \, \Omega$$

Von Klitzing, Conférence Nobel 1985



# Transport parallèle

<http://demonstrations.wolfram.com/ParallelTransportOnA2Sphere/>



$$\mathcal{A} = i \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle$$

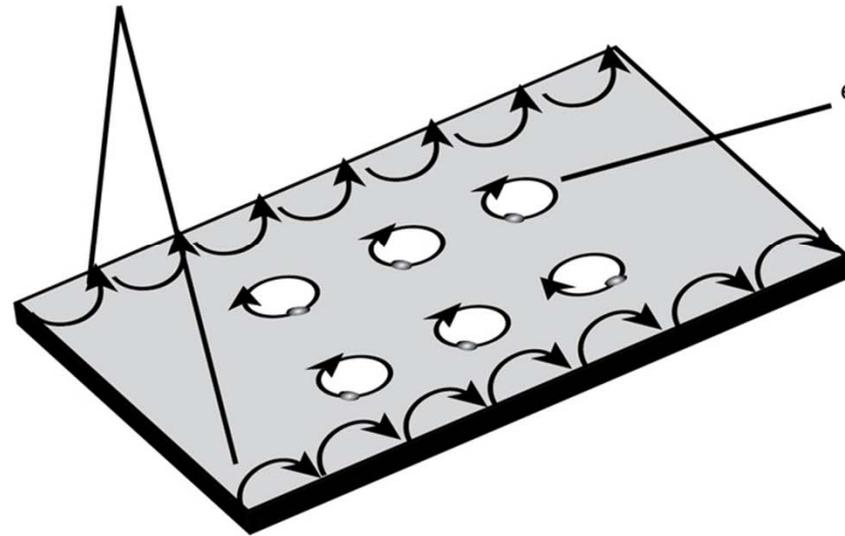


Xiao et al. Phys. Rev. B **53**, 7010 (1995)

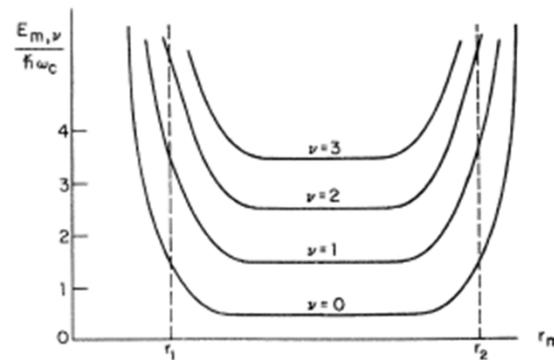


# États de bord

electrons can move along edge (conducting)



electrons localized in orbits (insulating)



B. Halperin PRB **25**, 2185, 1982



# États de la matière (Nobel 2016)

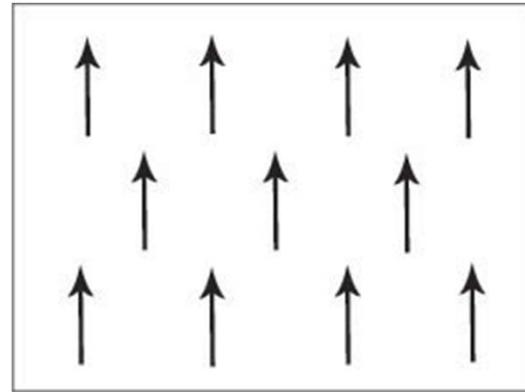
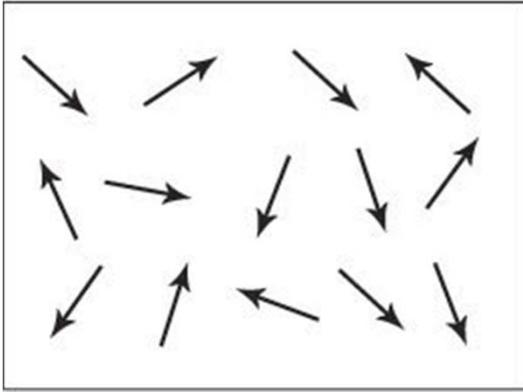
- Isolants topologiques (spintronique)
  - Isolants dans le volume
  - États de surface métalliques protégés par la symétrie
- Semi-métaux de Weyl
  - Bandes se croisant linéairement
  - États de bord
  - Électrodynamique particulière. Anomalie chirale: (ex: courant induit parallèlement au champ magnétique).



# Interactions



# États de la matière: symétrie brisée (ancien)



Rigidité

# Supraconductivité (Alexis Reymbaut)

Symétrie brisée (Higgs)

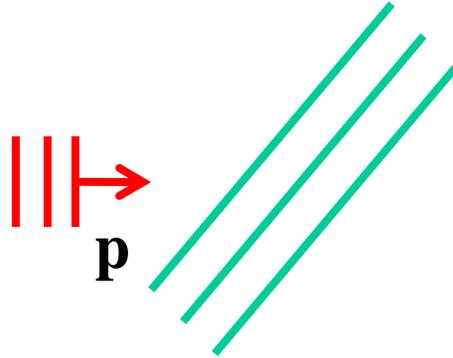
Étalon pour le volt

Magnétomètres

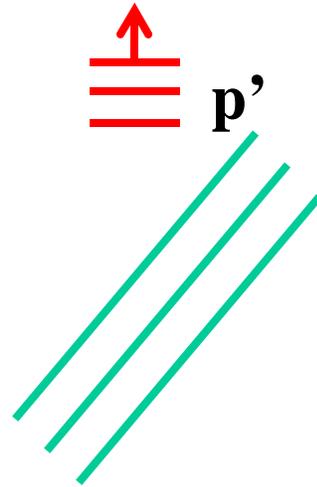
qubit



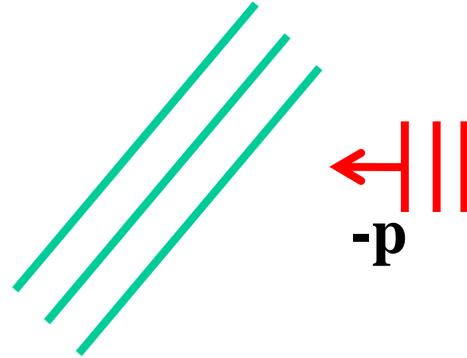
# Mécanisme d'attraction dans l'état métallique



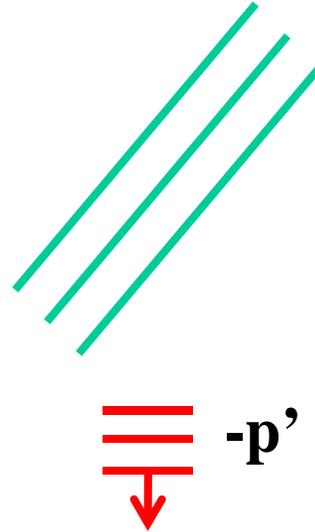
# Mécanisme d'attraction dans l'état métallique



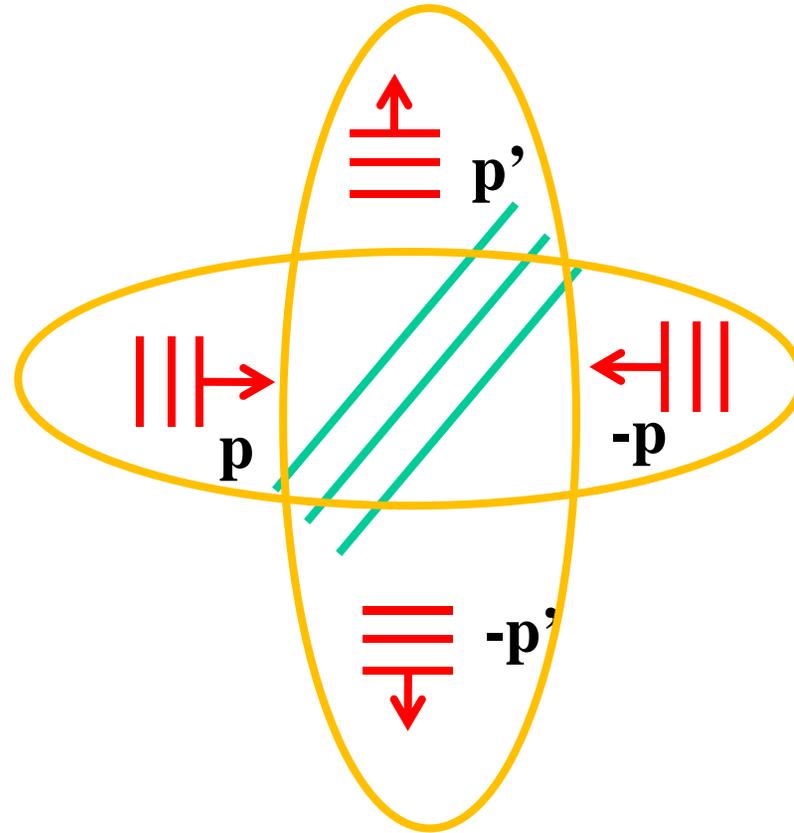
# Mécanisme d'attraction dans l'état métallique



# Mécanisme d'attraction dans l'état métallique



# Mécanisme d'attraction dans l'état métallique



# #1 Paire de Cooper, #2 Coherence de phase

$$E_P = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}\uparrow, -\mathbf{p}\downarrow} \psi_{\mathbf{p}'\uparrow, -\mathbf{p}'\downarrow}^*$$

$$|\text{BCS}(\theta)\rangle = \dots + e^{iN\theta} |N\rangle + e^{i(N+2)\theta} |N+2\rangle + \dots$$



# #1 Paire de Cooper, #2 Coherence de phase

$$E_P = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}\uparrow, -\mathbf{p}\downarrow} \psi_{\mathbf{p}'\uparrow, -\mathbf{p}'\downarrow}^*$$

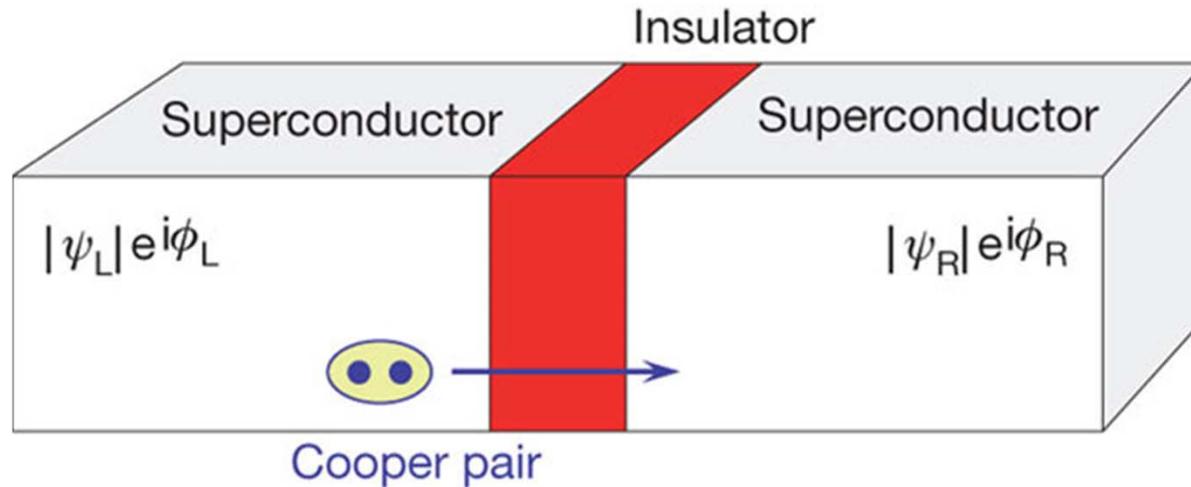
$$E_P = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \left( \langle \psi_{\mathbf{p}\uparrow, -\mathbf{p}\downarrow} \rangle \psi_{\mathbf{p}'\uparrow, -\mathbf{p}'\downarrow}^* + \psi_{\mathbf{p}\uparrow, -\mathbf{p}\downarrow} \langle \psi_{\mathbf{p}'\uparrow, -\mathbf{p}'\downarrow}^* \rangle \right)$$

$$|\text{BCS}(\theta)\rangle = \dots + e^{iN\theta} |N\rangle + e^{i(N+2)\theta} |N+2\rangle + \dots$$

Retardation: Eliashberg theory



# État quantique macroscopique



$$\psi_R^* \psi_L \propto \exp(-i(\phi_R - \phi_L))$$

$$\psi_R^* \psi_L \propto \exp\left(-i(\phi_R - \phi_L) - \frac{2\pi i(2e)}{h} \left( \int_L^R \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \int_{t_0}^t (V_R - V_L) dt \right)\right)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

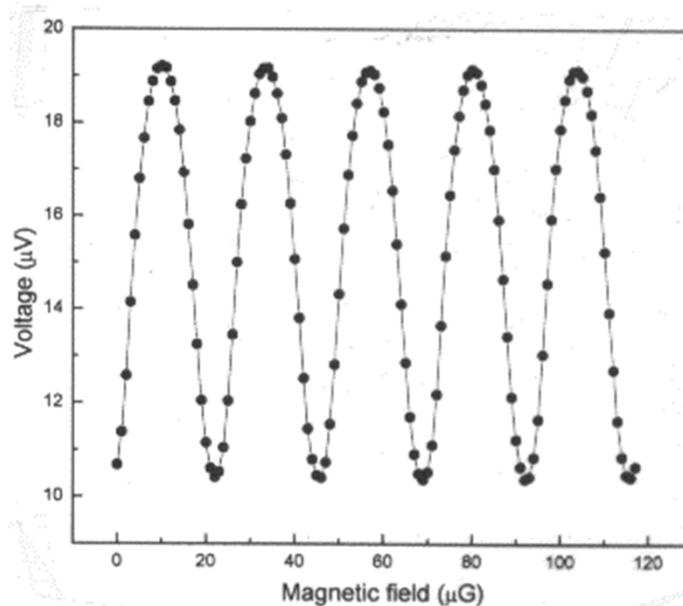
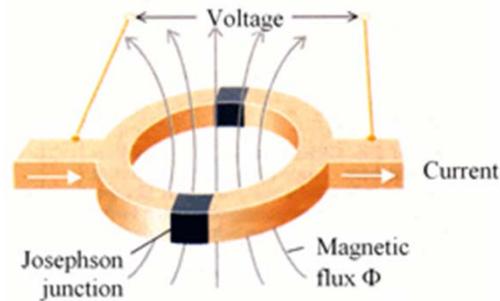


# Étalon pour le volt

$$K_{J-90} = 483\,597.9 \text{ GHz/V}$$



# Un phénomène quantique macroscopique

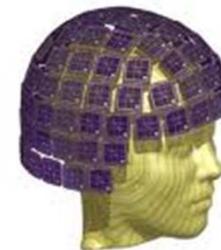


$$\Phi_0 = h/(2e)$$

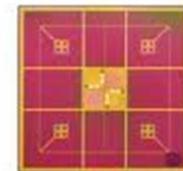
Figure 3.  $V$ - $\Phi$  characteristic of a typical DC SQUID. Output voltage is a periodic function of applied flux with the periodicity of a flux quantum  $\Phi_0$ .



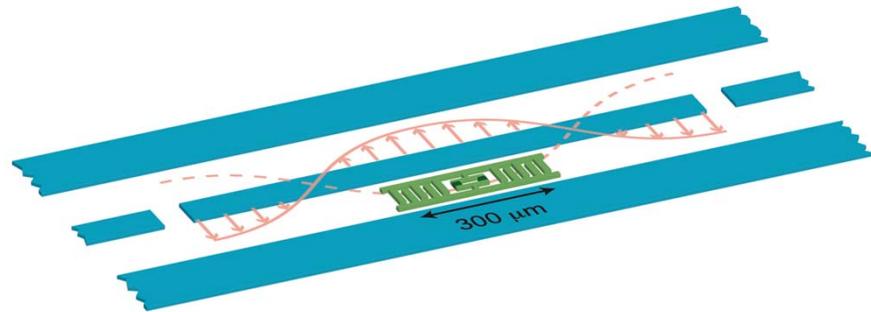
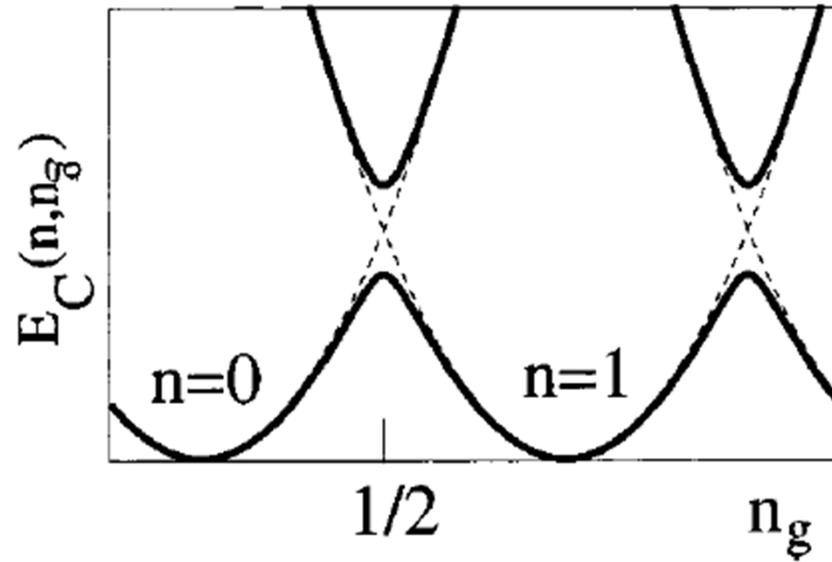
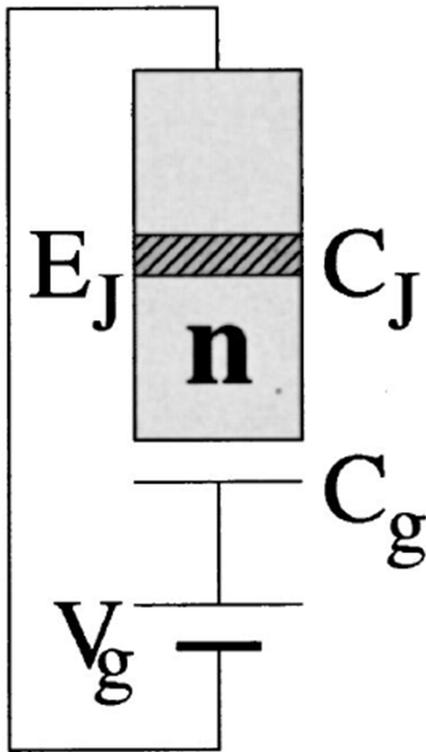
SQUID Sensors



- 306 independent measurement channels.
- Organized in channel-triplets on 102 silicon chips:
  - Two planar gradiometers
  - One radial magnetometer



# qubit



Makhlin et al. Rev. Mod. Phys. **73**, 357 (2001)



# Corrélations fortes, enchevêtrement

Prédire de nouveaux matériaux

Magnéto-caloriques (Patrick Fournier)

Jonction p-n bis



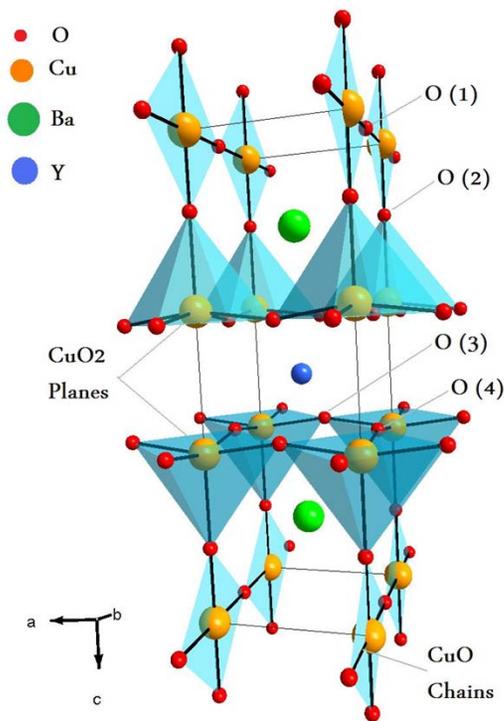
# Le lien chimique

=

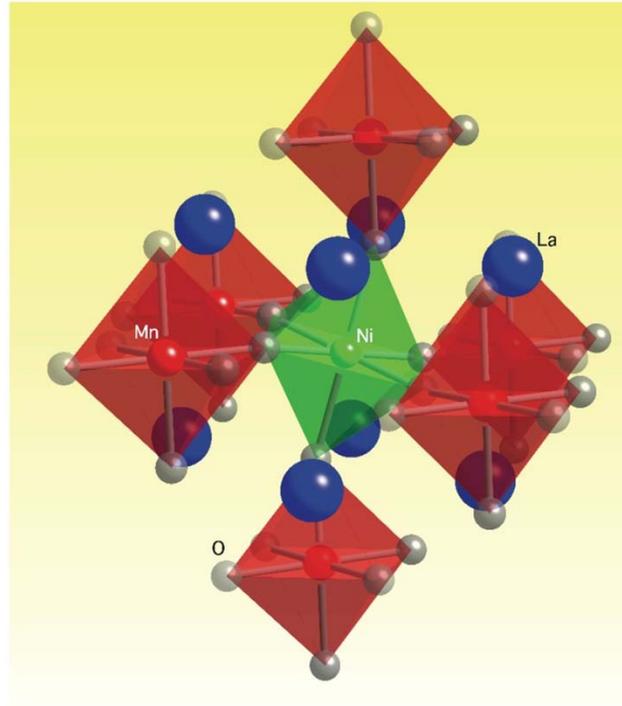
Intrication



# Supraconducteur à haute température



# Effet magnétocalorique géant



Image, Daniel Haskel



# Pouvoir thermoélectrique remarquable

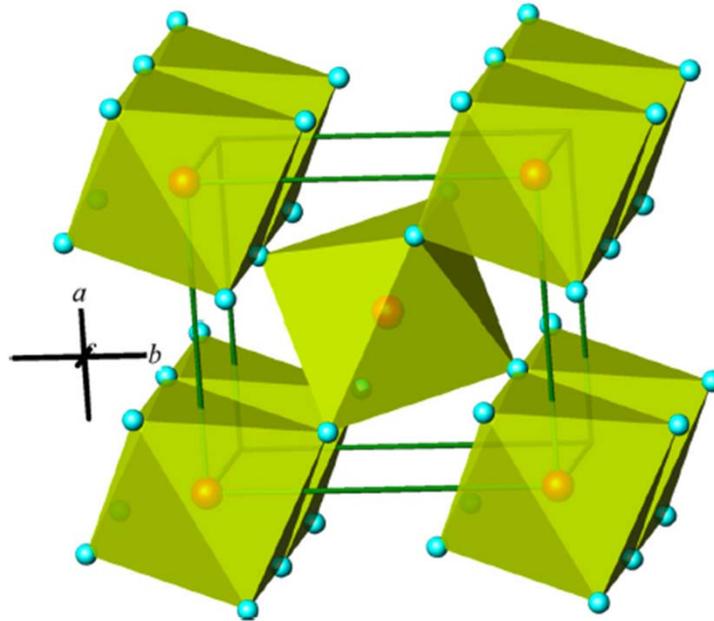


Image: Appl Magn Reson (2014) 45:1237–1252



# Oxydes de métaux de transition

## Tableau périodique des éléments

1												18						
IA												VIII A						
1	1 H 1,008 Hydrogène											13	14	15	16	17	2	
												III A	IV A	V A	VIA	VII A	2 He 4,00 Hélium	
2	3 Li 6,94 Lithium	4 Be 9,01 Béryllium											5 B 10,811 Bore	6 C 12,011 Carbone	7 N 14,007 Azote	8 O 15,999 Oxygène	9 F 19,00 Fluor	10 Ne 20,18 Néon
3	11 Na 22,99 Sodium	12 Mg 24,31 Magnésium	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26,98 Aluminium	14 Si 28,09 Silicium	15 P 30,974 Phosphore	16 S 32,065 Soufre	17 Cl 35,45 Chlore	18 Ar 39,95 Argon
4	19 K 39,10 Potassium	20 Ca 40,08 Calcium	21 Sc 44,96 Scandium	22 Ti 47,87 Titane	23 V 50,94 Vanadium	24 Cr 52,00 Chrome	25 Mn 54,94 Manganèse	26 Fe 55,85 Fer	27 Co 58,93 Cobalt	28 Ni 58,69 Nickel	29 Cu 63,55 Cuivre	30 Zn 65,41 Zinc	31 Ga 69,72 Gallium	32 Ge 72,64 Germanium	33 As 74,92 Arsenic	34 Se 78,96 Sélénium	35 Br 79,90 Brome	36 Kr 83,80 Krypton
5	37 Rb 85,47 Rubidium	38 Sr 87,62 Strontium	39 Y 88,91 Yttrium	40 Zr 91,22 Zirconium	41 Nb 92,91 Niobium	42 Mo 95,94 Molybdène	43 Tc [98] Technétium	44 Ru 101,07 Ruthénium	45 Rh 102,91 Rhodium	46 Pd 106,42 Palladium	47 Ag 107,87 Argent	48 Cd 112,41 Cadmium	49 In 114,82 Indium	50 Sn 118,71 Étain	51 Sb 121,76 Antimoine	52 Te 127,60 Tellure	53 I 126,90 Iode	54 Xe 131,29 Xénon
6	55 Cs 132,91 Césium	56 Ba 137,33 Baryum	57 La 138,91 Lanthane	72 Hf 178,49 Hafnium	73 Ta 180,95 Tantale	74 W 183,84 Tungstène	75 Re 186,21 Rhénium	76 Os 190,23 Osmium	77 Ir 192,22 Iridium	78 Pt 195,08 Platine	79 Au 196,97 Or	80 Hg 200,59 Mercure	81 Tl 204,38 Thallium	82 Pb 207,2 Plomb	83 Bi 208,98 Bismuth	84 Po [209] Polonium	85 At [210] Astate	86 Rn [222] Radon
7	87 Fr [223] Francium	88 Ra [226] Radium	89 Ac [227] Actinium	104 Rf [261] Rutherfordium	105 Db [262] Dubnium	106 Sg [266] Seaborgium	107 Bh [264] Bohrium	108 Hs [277] Hassium	109 Mt [268] Meitnerium	110 Ds [281] Darmstadtium	111 Rg [...] Roentgenium							
		58 Ce 140,12 Cérium	59 Pr 140,91 Praséodyme	60 Nd 144,24 Néodyme	61 Pm [145] Prométhium	62 Sm 150,36 Samarium	63 Eu 151,96 Europium	64 Gd 157,25 Gadolinium	65 Tb 158,93 Terbium	66 Dy 162,50 Dysprosium	67 Ho 164,93 Hollm	68 Er 167,26 Erbium	69 Tm 168,93 Thulium	70 Yb 173,04 Ytterbium	71 Lu 174,97 Lutétiem			
		90 Th 232,04 Thorium	91 Pa 231,04 Protactinium	92 U 238,03 Uranium	93 Np [237] Neptunium	94 Pu [244] Plutonium	95 Am [243] Américium	96 Cm [247] Curium	97 Bk [247] Berkélium	98 Cf [251] Californium	99 Es [257] Einsteinium	100 Fm [257] Fermium	101 Md [258] Mendélévium	102 No [259] Nobélium	103 Lr [262] Lawrencium			

**Numéro atomique:** 6 **C** **Carbone** **Symbole de l'élément**

**Principaux nombres d'oxydation:** (-4, -2, +2, +4) **Masse atomique** 12,011 **Électronégativité** 2,5

**Nom:** Carbone

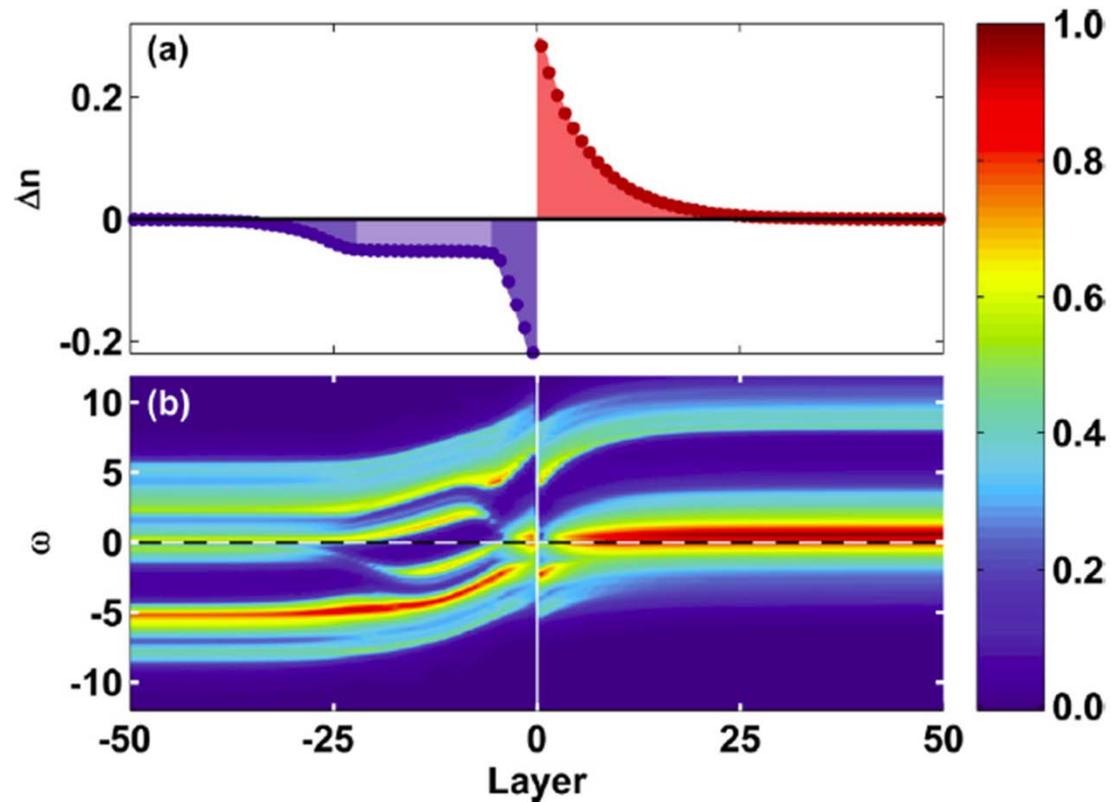
(2c): deux électrons célibataires (3p): trois paires d'électrons

Métaux	Métaux de transition	Non métaux	Gaz rares et inertes
--------	----------------------	------------	----------------------

Éléments artificiels

\* Signifie élément radioactif (instable)

# Jonction p-n d'oxydes de métaux de transition

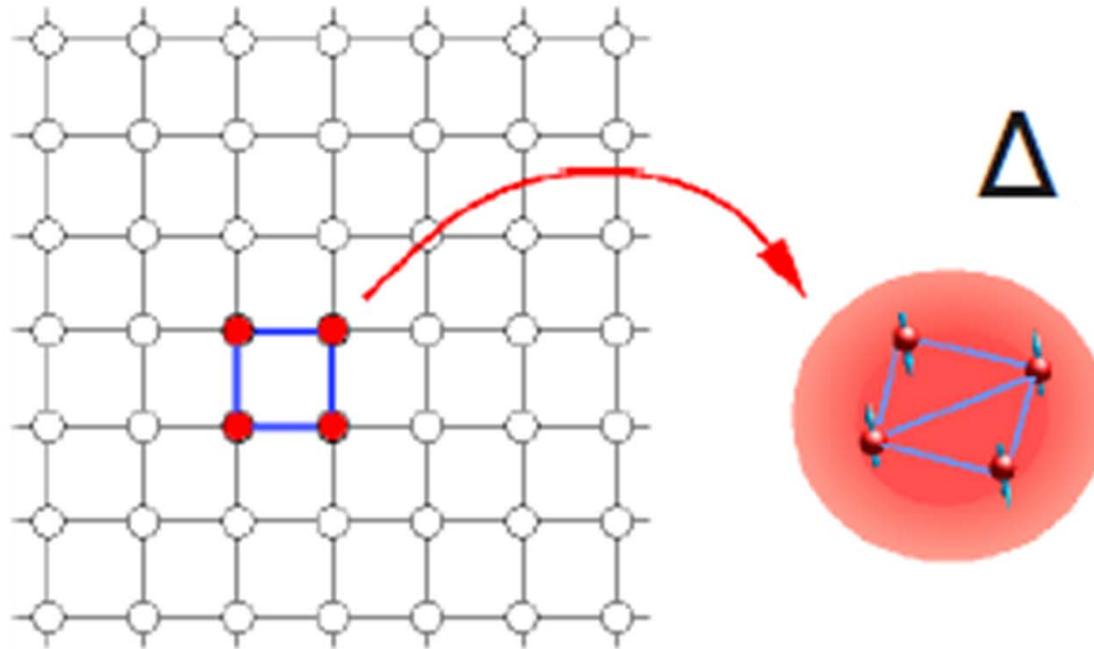


M. Charlebois et al. Phys. Rev. **87**, 035137 (2013)



# États propres localisés et délocalisés

Théorie de champ moyen dynamique



# DFT + Methodes pour électrons fortement corrélés

Anisimov et al. J. Phys. **9**, 7354 (1997)

G. Kotliar et al. RMP, **78**, 865 (2006)

P. Sémon et al. arXiv:1403.7214



Materials Genome Initiative



UNIVERSITÉ DE  
SHERBROOKE

# Des nouveaux concepts et des algorithmes de plus en plus performants

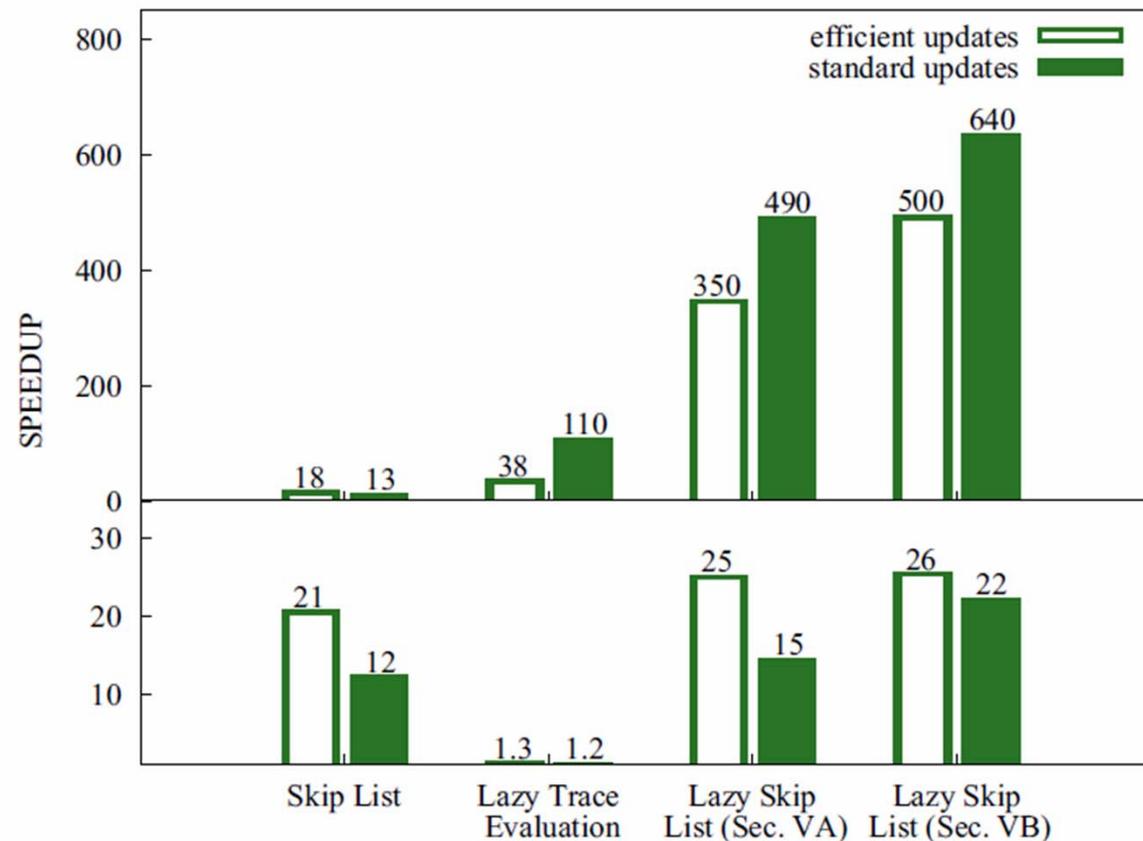
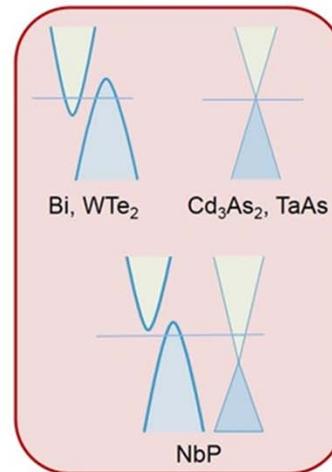
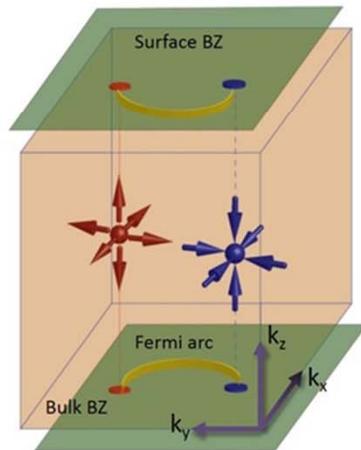
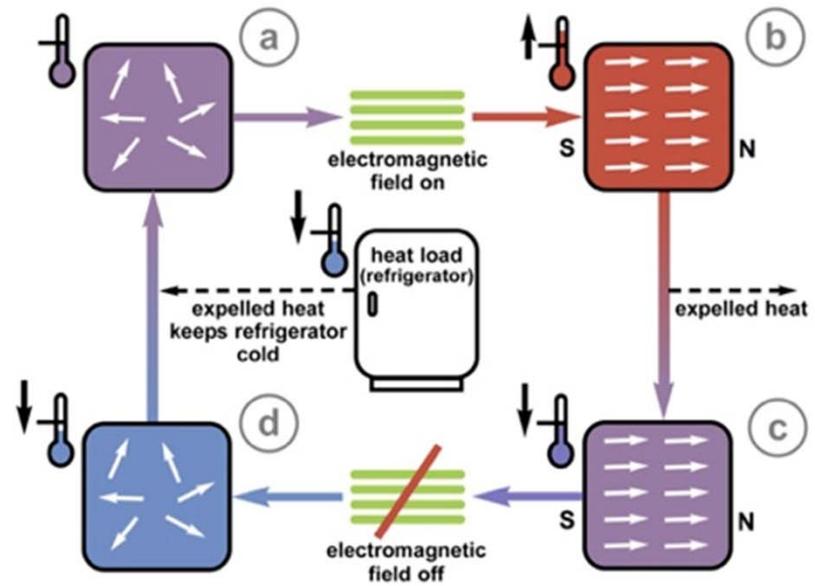


FIG. 1. (Color online) Benchmark of different optimizations presented in this paper on the basis of a LNO thin film simulation [27] (top panel) and a FeTe simulation (lower panel), using standard updates

Sémon et al. PRB 90, 075149 (2014)



# 3 axes, un thème



# Conclusion

## Science et technologie: Les inséparables....

- Machine à vapeur, Watt (1765)
- Thermo., Carnot (1824)
- Électron, Thomson (1897)
  - Télévision (1940...)
- Laser, (1960)
- CD-ROM (1980-90)
- Microélectronique et supraconductivité
- Induction, Faraday (1831)
- Moteur à induction (1880)
- Mécanique quantique, (1926)
  - Transistor, (1947)
- Révolution informatique, m.-el. (1980)
- Supraconductivité (1911)
- Imagerie médicale (1980-90)
- Ordinateur quantique



# Edward Bellamy (USA) 1887

- Roman: « Looking backward » 2000-1887
- Si nous pouvions inventer un dispositif pour offrir à tous de la musique dans leur maison, qui serait de qualité parfaite, de quantité illimitée, pour toutes les humeurs et qui commencerait et s'arrêterait lorsqu'on voudrait, alors nous aurions atteint la limite du bonheur pour l'homme et nous pourrions cesser de chercher des améliorations.



*Merci*