

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE : SCIENCES
DEPARTEMENT ; PHYSIQUE
N° :



DOMAINE : SCIENCES DE LA
MATIERE
FILIERE: PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE DES
PARTICULES A HAUTE ENERGIE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: LAIFAOUI FOUZI

Intitulé

**Problème de diffusion unidimensionnel avec
une masse dépendant de la position**

Soutenu le 05 / 06 /2017 devant le jury composé de:

MAIRECHE ABDELMADJID	Université de M'sila	Président
BOUFERRACHE KARIM	Université de M'sila	Rapporteur
BESKRI SALIHA	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2016/2017

Remerciements

Grand merci à Dieu de nous avoir donné la volonté, la santé, le courage pour accomplir ce travail.

*Je remercie tout particulièrement mon directeur de la recherche **Mr. K. Bouferrache** pour son aide, sa compréhension, ses orientations et surtout pour la qualité de son encadrement.*

Je remercie aussi les membres de jury d'avoir accepté ce modeste travail. Ma gratitude est également destinée aux enseignants du département de physique de l'université de M'sila.

J'adresse mes plus sincères remerciements à tous mes professeurs depuis le primaire jusqu'à l'université.

Je remercie ainsi, ma mère et mon père, mes frères et sœurs.

En fin, je vous remercie beaucoup pour tous ceux qui m'ont aidé à accomplir ce travail de loin ou de près.

Dédicace

*Je dédie ce modeste travail accompagné d'un profond amour :
à celle qui ma arrosé de tendresse et d'espoirs, à la source d'amour
Incessible, à la mère des sentiments fragiles qui ma bénie par ces*

Prières ma mère

à mon support dans ma vie, qui m'a appris m'a supporté et ma dirigé

Vers la gloire.....mon père

à mes chères frères et sœurs

A toutes les personnes de ma grande famille.



Table des matières

Table des matières

1 Introduction

Chapitre I

I.1. Introduction	3
I.2. historique.....	4
I.2.1D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966)	5
I.2.2 Thaddeus Gora et Ferd Williams (1968).....	5
I.2.3 Von Roos (1982).....	6
I.2.4 Richard A. Morrow et Kenneth R. Brownstein (1983).....	7
I.2.5 Jean-Marc Lévy-Leblond (1995).....	7
I.2.6 M. Sassoli de Bianchi a and M. Di Ventura (1998).....	8
I.2.6 Mustafa et Mazharimousavi(2007).....	8
I.3. l'hamiltonien effectif généralisé.....	9

Chapitre II

II.1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une marche en potentiel et en masse.....	12
II.1.1. Solution dans la région I.....	13
II.1.2. Solution dans la région II.....	13
II.1.3. Conditions de continuité.....	14
II.1.4 Coefficient de transmission et de réflexion.....	14
II.1.5Graphes des coefficients de transmission Marche en potentiel et en masse	16
II. 2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée	

Table des matières

pour un potentiel et une masse rectangulaires.	18
II.2.1. Solution dans la région I.....	18
II.2.2. Solution dans la région II.....	18
II.2.3. Solution dans la région III.....	18
II.2.4. Conditions de continuité.....	19
II.2.4.1. Raccord des régions I et II.....	19
II.2.4.2. Raccord des régions II et III.....	19
II.2.5. Coefficient de transmission	20
II.2.6. Graphes des coefficients de transmission Marche en potentiel et en masse.....	21

Chapitre III

III.1 Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale.	
III.1.1. Solution dans la région I.....	24
III.1.2. Solution dans la région II.....	24
III.1.3. Solution dans la région III.....	25
III.1.4. Solution dans la région IV.....	25
III.1.5. Solution dans la région V.....	26
III.2. Conditions de continuité.....	26
III.2.1. Raccord des régions I et II.....	27
III.2.2. Raccord des régions II et III.....	27
III.2.3. Raccord des régions III et IV	28
III.2.4. Raccord des régions IV et V.....	28
III.3. Le coefficient de transmission	32
III.4. Graphes des coefficients de barrière de potentiel rectangulaire et	

Table des matières

masse variable trapézoïdale	32
Conclusion.....	35
Bibliographie	
Annexe	

Introduction

L'homme a toujours voulu comprendre les phénomènes qui l'entourent et, par conséquent, connaître les lois suivant les quelles ces phénomènes se manifestent. En employant toutes ses connaissances, et pour ce faire, il utilisa différentes méthodes et approches et proposa donc plusieurs modèles, en essayant toujours d'expliquer, de la façon la plus correcte et la plus élégante, les résultats et les faits expérimentaux qui sont à sa disposition.

Parallèlement au développement des sciences physiques sur le plan expérimental, l'outil mathématique, nécessaire pour le développement théorique de cette nouvelle branche de la physique, connaîtra aussi une progression éclatante. En effet, durant les 70 dernières années, le domaine d'étude des systèmes quantiques a été de plus en plus enrichi par de nouvelles méthodes et approches mathématiques, analytiques et algébriques, à travers les travaux d'une centaine de physiciens.

L'idée de trouver les états liés d'une particule non relativiste ou relativiste dont la masse est une fonction de l'espace n'est pas inattendue. En effet, il existe beaucoup de problèmes en physique, en chimie, en biologie ou même en médecine où l'on peut assimiler l'évolution d'un phénomène par une équation du type Schrödinger, Klein-Gordon ou même de Dirac, relative à une particule de masse variable dans l'espace. Pour se limiter seulement en physique du solide, le mouvement d'une particule dans un potentiel périodique, représentant le réseau cristallin, est assimilé au mouvement d'une particule libre avec une masse effective, qui dépend essentiellement des caractéristiques du réseau. Si l'échantillon est composé de plusieurs parties représentant des matériaux différents, appelées hétérostructures, la masse prendra des valeurs différentes dans chaque partie (structure). La systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position a été le sujet de beaucoup d'activité de recherches, Les modèles avec des masses dépendant de la position (**Position Dependent Mass** \equiv **PDM**) jouent un rôle important dans la description des propriétés électroniques des semi-conducteurs [1], en physique nucléaire [2], en physique de la matière condensée [3-4], dans les théories des puits et points quantiques [5], dans le domaine des cristaux liquides [6], ... Dans les travaux théoriques sur les systèmes avec PDM, un des grands défis est la recherche de solutions exactes de l'équation de

Introduction

Schrödinger, généralisée dans le cas non relativiste Von Roos [17] , et des équations de **Klein-Gordon** et de **Dirac** dans celui relativiste.

Le mémoire est structuré en 3 chapitres en plus d'une introduction et de la conclusion.

Dans le chapitre I, nous présentons un aperçu assez général sur historique de L'étude des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position PDM en mécanique quantique. Nous insistons sur les propriétés requises pour un Hamiltonien généralisé dépendant de plusieurs paramètres, pour qu'il puisse être traité par cette approche et nous donnons les expressions générales de l'équation Schrödinger généralisé indépendante du temps et des énergies propres et fonctions propres normalisées dans un contexte général.

Dans ce chapitre II nous allons aborder la résolution de l'équation Schrödinger généralisé indépendante du temps pour un modèle intéressant en utilisant l'approche de la transformation de la fonction propre et Résultats analytique et numériques des fonctions d'onde et des coefficients de transmission les résultats obtenus par Lévy -Leblond [31].

1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une Marche en potentiel et en masse .
2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour un potentiel et une masse rectangulaires.

Le chapitre III est consacré à l'étude du spectre d'une particule de masse dépendante de la position, On utilisation l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale a été étudié dans la référence [23, 24] et Calcul analytique des fonctions d'onde et Résultats numériques des fonctions d'onde des coefficients de transmission.

I.1 Introduction

La quantification de l'Hamiltonien classique d'une particule soumise à un potentiel et dont la masse est une fonction de sa position n'est pas une chose évidente. Il faut en principe passer par plusieurs étapes. La première consiste à partir de l'équation de Newton classique et déterminer d'abord le Lagrangien dont elle dérive. Ensuite, il faut construire le Hamiltonien correspondant par les techniques usuelles et enfin, quantifier ce dernier. Cette dernière étape revient à symétriser l'Hamiltonien obtenu vis-à-vis des opérateurs impulsion et position pour le rendre Hermitien. Dans l'histoire, cette démarche n'est pas suivie; c'est juste la dernière étape qui est considérée. Autrement dit, à partir d'un Hamiltonien quantique connu, pour une particule de masse constante, on suppose que cette dernière est une fonction de l'espace et on le symétrise. Ceci revient à symétriser juste la partie cinétique, qui se présente généralement comme des produits de l'opérateur impulsion et de fonctions de l'espace.

Pour les problèmes, à une dimension, que nous considérons dans ce travail, nous dénotons par :

$$m = m(x) \quad (I.1)$$

Nous admettons aussi que l'Hamiltonien classique est une simple somme de la partie cinétique et de l'énergie potentiel.

$$H = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hat{P}(x)^2}{m(x)} \right\} + V(x) \quad (I.2)$$

L'équation de Schrödinger stationnaire s'écrira donc sous la forme

$$\left\{ \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hat{P}(x)^2}{m(x)} \right\} + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (I.3)$$

Entre autre, en représentation position, où l'opérateur impulsion est donné par

$$\hat{P}(x) = -i \hbar \partial_x \quad (I.4)$$

En fait, il n'existe aucune recette à suivre pour la symétrisation de la partie cinétique et plusieurs propositions ont été faites dans la littérature [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28,

29, 30, 31,32, 33]. La proposition qui a reçu plus d'intérêt par la communauté des physiciens revient à Von-Roos [32, 33]. Il a suggéré une expression générale dépendant de deux paramètres ajustables, donnée sous la forme :

$$\frac{\hat{p}(x)^2}{m(x)} = \frac{1}{4} [m(x)^\alpha Pm(x)^\beta Pm(x)^\gamma + m(x)^\gamma Pm(x)^\beta Pm(x)^\alpha] \tag{I.5}$$

où α , β et γ sont des nombres réels, qui doivent évidemment satisfaire la contrainte suivante :

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \tag{I.6}$$

En particulier, pour $\alpha = \gamma = 0$, et $\alpha = \gamma = -\frac{1}{4}$, on retrouve les cas particuliers (I.4) et (I.5). Par conséquent, chaque choix des paramètres α , β et γ correspondra à un Hamiltonien différent et par conséquent, le même problème physique conduira à des spectres différents. Pour cette raison, les paramètres α , β et γ sont souvent appelés, paramètres **d'ambiguïté**.

Ainsi, en éliminant un des paramètres par l'intermédiaire de la contrainte (2.6), la partie cinétique de Von Roos s'exprime en fonction de deux paramètres libres. Parfois, l'un des deux paramètres ou même tous les deux doivent être fixés à des valeurs bien déterminées ou même contraints à satisfaire certaines relations pour que le système possède des états liés. Si ce n'est pas le cas, le spectre du problème en question sera fonction de ces deux paramètres. L'existence de paramètres libres dans les expressions analytiques du spectre d'un problème peut avoir plusieurs avantages. Par exemple, ces paramètres peuvent être ajustés de telle sorte à approcher les valeurs expérimentales d'un problème physique connu.

Par construction l'hamiltonien de **Von- Roos** est hermétique. Différentes formes de l'hamiltonien sont employées dans la littérature selon les choix de l'ensemble de paramètres d'ambiguïté.

Ainsi Gora et Williams [18] ont choisi($\beta = \gamma=0$ et $\alpha=-1$)

Ben Daniel et Duke [19] avait opté pour ($\alpha = \gamma=0$ et $\beta =1$)

Zhu et Kroemer [20] pour ($\alpha = \gamma=-1/2$ et $\beta =0$)

Li et Kuhn [21] pour ($\beta = \gamma=-1/2$ et $\alpha =0$)

Mustafa et Mazharimousavi [22] ont eux proposé

($\alpha = \gamma = -1/4$ et $\beta = -1/2$).

Comment choisir les paramètres α et β pour déterminer de façon unique et non ambiguë l'hamiltonien idéal qui régirait des systèmes à potentiels et à masse spatialement dépendant. Ces paramètres sont-ils universels ? ou bien dépendent-ils des matériaux étudiés, de l'allure des formes continues ou discontinues du potentiel et de la masse ? Peut-on les déterminer expérimentalement ou à travers les principes de base de la mécanique quantique ? Plusieurs travaux ont abordé ce problème du choix des paramètres α et β . minimiser certaines valeurs propres.

I.1. historique

I.1.1D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966)

Dans cet article [19], le modèle de **Bethe -Sommerfeld** pour l'effet tunnel d'un électron est pris comme cadre pour l'étude de la pénétration à travers une barrière. En particulier ils ont étudié le cas où la courbure (la masse de l'électron) et le centre de surface des surfaces d'énergie constant e d'un électron varient à travers la jonction. En conclusion, ces auteurs préconisent la forme adéquate suivante de l'hamiltonien

$$H_{BDD} = \frac{1}{2} \left[P \frac{1}{m(x)} P \right]$$

$$\text{Où } P = -i \hbar \frac{d}{dx}$$

I.1.2 Thaddeus Gora et Ferd Williams (1968)

Dans cet article [18], **Thaddeus Gora et Ferd Williams** ont étudié des semi-conducteurs lentement gradués dont les masses effectives dépendent de la position, décrits en termes d'un hamiltonien effectif. Ce dernier est pris sous la forme hermitique $H_{GW(B)} = \frac{1}{4} \left[P^2 \frac{1}{m(x)} + \frac{1}{m(x)} P^2 \right]$ Les semi-conducteurs qui ont une gradation lente dans leur composition présentent des bandes d'énergie et des masses effectives qui dépendent de la position, et qui globalement sont décrits par un hamiltonien effectif à travers une équation à masse effective.

Le problème des phénomènes de transport des porteurs de charge minoritaires pour des systèmes gradués sont gouvernés par un champ effectif qui inclut le champ électrostatique plus un terme en fonction du gradient de la pente de la bande, et un

autre terme qui dépend du gradient de la masse effective. La durée de vie de la recombinaison locale radiative ainsi que la densité locale des états des semi-conducteurs inhomogènes y sont discutés. L'équation pour l'excès de la concentration des porteurs de charge minoritaires dans un semi-conducteur inhomogène y est déduite et diffère de celle d'un système homogène par le fait que : le champ effectif est remplacé par le champ électrique, la dépendance spatiale de la durée de vie et de la mobilité, et aussi par le terme dépendant du gradient de la mobilité des charges.

I.1.3 Von Roos (1982)

Dans cet article [17] Von Ross a considéré que le mouvement des porteurs libres (électrons et trous) dans les semi-conducteurs d'une composition chimique non uniforme est parfois décrit par un hamiltonian possédant une masse effective dépendant de la position. Dans des travaux antérieurs, il a montré que les masses dépendant de la position

conduisent à des incohérences en raison du théorème de Bargmann, qui postule que la superposition cohérente d'états de masses différentes (paquets d'ondes) est interdite. Il a aussi montré comment éviter cette règle de sélection. Il a dérivé une extension du théorème de Bargmann à l'effet que les hamiltoniens avec des masses dépendant de la position ne sont pas invariants galiléens. En outre, il a également montré que la dérivation habituelle des hamiltoniens effectifs de masse dépendant de la position est loin d'être unique. Il existe, en général, de nombreux hamiltoniens non équivalents dans la même approximation, tous sont déduits de la base de nombreux corps hamiltonien, aussi longtemps que la notion de masse dépendant de la position est maintenue. En raison du manque d'unicité et de l'absence d'invariance galiléenne de théories de la masse effective variable, il semble approprié d'abandonner la notion de masse dépendant de la position. Dans des travaux antérieurs, il a montré comment le faire avec succès, dans son article [17], il a critiqué le concept de masse dépendant de la position dans la théorie des semi-conducteurs. Il montre que le hamiltonien de **Wannier** dans l'approximation de la masse effective est unique. Le concept de masse effective dépendant de la position est un concept classique qui, dans sa forme classique, est unique et très utile pour l'analyse des dispositifs semiconducteurs. Mais dans un autre article [34], Von Roos considère un semiconducteur composé possédant une composition chimique ayant une masse variant lentement dépendant de la position. Il obtient une équation de masse effective régissant la dynamique de

l'électron (ou trou) en utilisant la représentation de Kohn-Luttinger et des transformations canoniques. Il montre que, tant que la variation de la composition chimique peut être considérée comme une perturbation, les masses effectives deviennent constantes. L'équation de la masse effective calculée, est identique à l'équation de la masse effective obtenue antérieurement par lui-même, en utilisant une représentation de Wannier.

I.1.4 Richard A. Morrow et Kenneth R. Brownstein (1983)

Morrow [33] a considéré une classe de hamiltoniens hermitiques de masse effective dont l'énergie cinétique est de la forme

$$\frac{1}{4} [m(x)^\alpha P m(x)^\beta P m(x)^\gamma + m(x)^\gamma P m(x)^\beta P m(x)^\alpha] \text{ avec } \alpha + \gamma + \beta = -1$$

Il a appliqué ces hamiltoniens à une hétérojonction abrupte entre deux cristaux, puis il a recherché les conditions de continuités correspondant à travers la jonction sur la fonction d'onde de la masse effective ψ et sa dérivée spatiale ψ' . Il a constaté que pour $\alpha \neq \gamma$, la fonction d'onde devrait s'annuler sur la jonction, ce qui implique que la jonction agit comme une barrière infranchissable. Par conséquent, les seuls cas viables doivent vérifier $\alpha = \gamma$

ce qui implique que $m(x)^\alpha \psi$ et $m(x)^{\alpha+\beta} \psi$ doivent être continues à travers la jonction.

Dans une deuxième contribution [35] Morrow suggère pour une hétérojonction abrupte entre deux semi-conducteurs non uniforme à une dimension d'utiliser l'hamiltonien à masse effective :

I.1.5 Jean-Marc Lévy-Leblond (1995)

Jean-Marc Lévy-Leblond [32], a appliqué la notion d'invariance galiléenne

instantanée pour montrer que l'idée de la masse effective dépendant de la position est consistante et utile. De plus, cela conduit aux conditions de continuités de la fonction d'onde ψ et de $\frac{1}{m} \partial_x \psi$. Ces résultats sont également proposés dans le cas d'hétérojonctions abruptes dans l'approximation de la fonction enveloppe.

Dans un autre article antérieur [31], il a traité les problèmes les plus simples, à savoir ceux d'une marche, d'une barrière et d'un réseau en potentiel et en masse. En

utilisant des conditions de continuité modifiées, il a mis l'accent sur les caractéristiques nouvelles de ces modèles quantiques élémentaires à potentiels constants par morceaux, généralisés au cas d'une masse dépendant de la position .

I.1.6 M. Sassoli de Bianchi a and M. Di Ventura (1998)

Dans leur article [23] sous le titre " Une remarque sur la limite de haute énergie d u problème de la diffusion avec la masse dépendant de la position" , ces deux auteurs sont arrivé à la conclusion que l e coefficient de transmission du problème de diffusion définie par l 'équation Schrödinger:

$$\left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + E - V(x) \right\} \psi(x) = 0$$

tend vers l'unité quand l'énergie augmente indéfiniment , à la seule condition que la masse entrée dans l'équation de Schrödinger soit une fonction continue. Même si le dernier cas représente la situation courante dans les réalisations pratiques des dispositifs, les progrès de la croissance des hétérostructures et les techniques de jet moléculaire permettent actuellement, de réaliser des interfaces abruptes à différents matériaux.

I.1.6 Mustafa et Mazharimousavi(2007)

Ces auteurs [34] ont utilisé la notion d'opérateur pseudo - moment pour aboutir à la conclusion que le " bon ordre fiable " est le choix $(\alpha = -\frac{1}{4}, \beta = -1/2)$

Le mouvement des électrons dans les semi-conducteurs est souvent décrit par l'équation de Schrödinger avec une masse dépendant de la position. Il s'agit en fait de la masse effective de l'électron qui se meut à l'intérieur du semi-conducteur, et dont la valeur dépend de la nature du matériau traversé. Les solutions exactes d'équations de Schrödinger avec masse effective dépendant de la position et pour certaines formes de potentiels physiques ont beaucoup attiré l'attention ces dernières années [24-30].

Pour un système à masse dépendant de la position, les opérateurs masse et impulsion ne commutent plus. Se pose, en conséquence, le problème du choix de l'ordre correct des ces deux opérateurs dans le terme de l'énergie cinétique de l'hamiltonien effectif . Cette question est directement liée aux conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une jonction abrupte. Von Roos [17] a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H = -\frac{1}{4} [m^\alpha \hat{P} m^\beta \hat{P} m^\gamma + m^\gamma \hat{P} m^\beta \hat{P} m^\alpha] + V$$

I.2.2 l'hamiltonien effectif généralisé

La quantification de l'Hamiltonien classique d'une particule soumise à un potentiel et dont la masse est une fonction de sa position n'est pas une chose évidente. Il faut en principe passer par plusieurs étapes. La première consiste à partir de l'équation de Newton classique et déterminer d'abord le Lagrangien dont elle dérive.

La proposition qui a reçu plus d'intérêt par la communauté des physiciens revient à **Von-Roos** [32, 33]. Il a suggéré une expression générale dépendant de deux paramètres ajustables, donnée sous la forme

$$H = -\frac{1}{4} [m(x)^\alpha \hat{P}(x) m(x)^\beta \hat{P}(x) m(x)^\gamma + m(x)^\gamma \hat{P}(x) m(x)^\beta \hat{P}(x) m(x)^\alpha] + V(x)$$

Et x est une position

$V(x)$: potentiel

où α , β et γ sont des nombres réels, qui doivent évidemment satisfaire la contrainte suivante :

$$\alpha + \beta + \gamma = -1$$

Par conséquent, chaque choix des paramètres α , β et γ correspondra à un Hamiltonien différent et par conséquent, le même problème physique conduira à des spectres différents. Pour cette raison, les paramètres α , β et γ sont souvent appelés, paramètres **d'ambiguïté**.

l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être écrite comme [35]:

$$H \psi(x) = E \psi(x) \tag{I.1}$$

L'opérateur impulsion est donné par :

$$\hat{P}(x) = -i \hbar \partial_x$$

L'hamiltonien effectif général est donné par :

$$H = -\frac{1}{4} [m(x)^\alpha \hat{P}(x) m(x)^\beta \hat{P}(x) m(x)^\gamma + m(x)^\gamma \hat{P}(x) m(x)^\beta \hat{P}(x) m(x)^\alpha] + V(x)$$

(I.2)

On remplace \hat{P} et H dans (I.1) il vient :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{4} \left[m(x)^\alpha \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\gamma + m(x)^\gamma \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\alpha \right] + V(x) - E \right\} \psi(x) = 0$$

On dérive l'équation suivantes :

$$m(x)^\alpha \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\gamma \psi(x) = m(x)^\alpha \frac{d}{dx} \left\{ \gamma m(x)' m(x)^{\gamma+\beta-1} + m(x)^{\beta+\gamma} \frac{d}{dx} \right\} \psi(x) \quad (I.3)$$

et

$$m(x)^\gamma \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\alpha \psi(x) = m(x)^\gamma \frac{d}{dx} \left\{ \gamma m(x)' m(x)^{\alpha+\beta-1} + m(x)^{\beta+\alpha} \frac{d}{dx} \right\} \psi(x) \quad (I.4)$$

Les dérivées seconde

$$m(x)^\gamma \frac{d}{dx} \left[\gamma m(x)' m(x)^{\alpha+\beta-1} + m(x)^{\beta+\alpha} \frac{d}{dx} \right] =$$

$$\left[\gamma m''(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} + \gamma (\gamma + \beta - 1) m'(x)^2 m(x)^{\gamma+\beta-2} + \right.$$

$$\left. \gamma m'(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} \frac{d}{dx} + (\gamma + \beta) m'(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} \frac{d}{dx} + m(x)^{\gamma+\beta} \frac{d^2}{dx^2} \right] \quad (I.5)$$

et

$$m(x)^\alpha \frac{d}{dx} \left[\gamma m(x)' m(x)^{\alpha+\beta-1} + m(x)^{\beta+\alpha} \frac{d}{dx} \right] =$$

$$\left[\alpha m''(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} + \alpha (\alpha + \beta - 1) m'(x)^2 m(x)^{\alpha+\beta-2} + \alpha m'(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} \frac{d}{dx} \right.$$

$$\left. + (\alpha + \beta) m'(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} \frac{d}{dx} + m(x)^{\alpha+\beta} \frac{d^2}{dx^2} \right] \quad (I.6)$$

Où $m'(x)$ et $m''(x)$ désignent respectivement les dérivées première et seconde de la distribution de la masse $m(x)$ par rapport à la variable x .

En utilisant les relations (I.6) et (I.5), on trouve :

$$H = \frac{\hbar^2}{4} \left[\gamma \frac{m''(x)}{m^2(x)} + \gamma(\gamma + \beta - 1) \frac{m'(x)^2}{m^3(x)} + \gamma \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} + \right.$$

$$\left. (\gamma + \beta) \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} - \frac{1}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha \frac{m''(x)}{m^2(x)} + \alpha(\alpha + \beta - 1) \frac{m'(x)^2}{m^3(x)} + \alpha \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} + \right.$$

$$\left. (\alpha + \beta) \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} - \frac{1}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} \right] + V(x) \quad (I.6)$$

Après la simplification

Donc L'hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = \left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} \right\} + \tilde{V}(x)$$

Où $\tilde{V}(x)$, qui sera appelé potentiel effectif, est la somme du potentiel physique et du potentiel d'ambiguïté

$$\tilde{V}(x) = V(x) - [(1 + \beta)m'(x)m''(x) - 2(\beta + 1) + \alpha(\beta + \alpha + 1)] \frac{1}{4m^3(x)}$$

L'équation de Schrödinger s'écrira donc:

$$\left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} + \tilde{V}(x) - E \right\} \psi(x) = 0 \quad (\text{I.6})$$

Chapitre II

Calcul analytique des fonctions d'onde et des coefficients de transmission

Introduction

Nous nous proposons de résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension pour une particule non relativiste, dont la masse dépend de la position

II.1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une marche en potentiel et en masse

La marche de potentiel permet de décrire divers systèmes physiques en première approximation: la surface d'un métal par exemple, dans le métal, on peut considérer, en première approximation, que les électrons de conduction sont mis en commun et constituent un gaz d'électrons susceptibles de se déplacer librement. Les électrons restent piégés dans le métal car ils ne possèdent pas une énergie cinétique suffisante pour s'échapper. La région (I) de la figure (1) représente alors le métal tandis que la région II représente l'extérieur du métal.

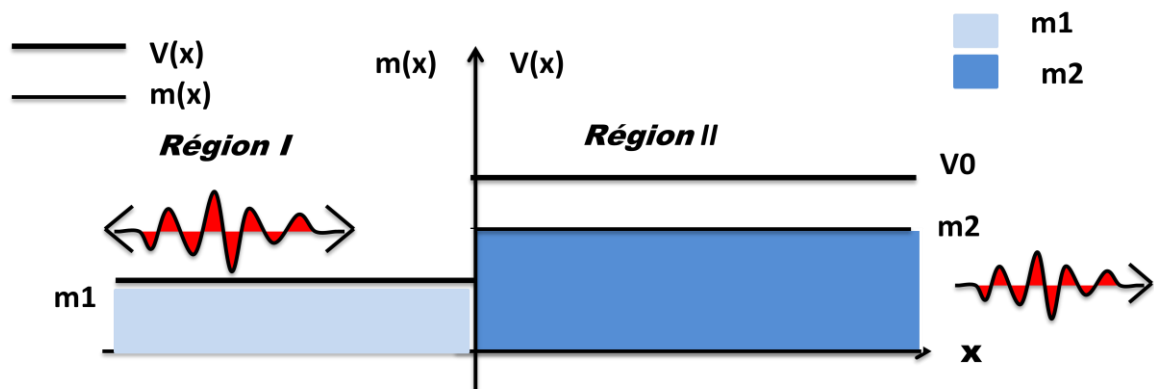


Figure (01)

Figure (01) : marche de potentiel et en masse

Considérons une particule dans un potentiel type marche de potentiel, c'est-à-dire une particule de masse $m(x)$ soumise à l'énergie potentiel $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{pour } (x < 0) & \text{Région I} \\ V_0 & \text{pour } (x > 0) & \text{Région II} \end{cases}$$

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{pour } (x < 0) & \text{Région I} \\ m_2 & \text{pour } (x > 0) & \text{Région II} \end{cases}$$

Il est facile de prouver que l'hamiltonien peut être écrit comme :

$$\left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} + \tilde{V}(x) - E \right\} \psi(x) = 0$$

Dans le but de résoudre l'équation de Schrödinger calcul des fonctions d'onde dans chaque région de potentiel d'où l'on déduit le coefficient de transmission et de réflexion.

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans les deux zones.

I I.1.1. Solution dans la région I

Dans le cas ($E, V_0 = 0$)

L'équation de Schrödinger dans la **région I**:

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \right\} \psi(x) = 0$$

Avec ; $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right\} \psi(x) = 0$$

La solution générique dans la région I s'écrit :

$$\psi(x)_I = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (\text{II.1})$$

$$\begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} \\ A_1' e^{-ik_1 x} \end{cases} : \text{Les fonctions d'onde transmission et réflexion}$$

A_1, A_1' : sont des constantes d'intégration

Supposons que la particule provienne de la région (I) et se dirige vers la région(II). Elle peut être transmise ou réfléchi sur la barrière.

I I.1.2. Solution dans la région II

L'équation de Schrödinger dans la **région II**:

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \right\} \psi(x) = 0$$

(Si $E < V_0$, $k_2^2 = \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow k_2$: est un nombre complexe et que l'on peut écrire

$$k_2^2 = (-1) \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow k_2^2 = (i)^2 \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow k_2 = \pm i \sqrt{\frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

Nous avons le même calcul pour trouver le coefficient de transmission dans le

Cas($E > V_0$)

La solution générique dans la région II s'écrit :

$$\psi(x)_{II} = A_2 e^{ik_1 x} + A_2' e^{-ik_1 x}$$

A_1, A_2' : sont des constantes d'intégration

$A_2' = 0$ car l'onde vient de la gauche.

donc La solution est :

$$\psi(x)_{II} = A_2 e^{ik_2 x} \quad (II.2)$$

I I.1.3. Conditions de continuité :

Les choix de **Lévy-Leblond** continue La fonction d'onde et La dérivée de la fonction d'onde sur la masse en $x=0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(0)_1 = \psi(0)_2 \Rightarrow A_1 + A_1' = A_2 \end{array} \right. \quad (II.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m_1} \psi(0)'_1 = \frac{1}{m_2} \psi(0)'_2 \Rightarrow \frac{ik_1}{m_1} (A_1 - A_1') = \frac{ik_2}{m_2} A_2 \end{array} \right. \quad (II.4)$$

Posons $v_i = \frac{\hbar k_i}{m_i}$

Qui permet de transformer L'équation (II.4) et la mettre sous la forme

$$(A_1 - A_1') = \frac{v_2}{v_1} A_2$$

En utilisant la collection de l'équation (II.3) et (II.4)

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 + A_1' = A_2 \\ A_1 - A_1' = \frac{v_2}{v_1} A_2 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{A_2}{A_1} = \frac{2v_1}{v_1 + v_2} \\ \frac{A_1'}{A_1} = \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \end{array} \right. \quad (II.5)$$

$$(II.6)$$

I I.1.4. Coefficient de transmission et de réflexion.

Les solutions d'ondes planes sont utilisées pour décrire des courants stationnaires de particules. Pour évaluer les probabilités de réflexion et de transmission d'un tel faisceau, comparons les flux réfléchi et transmis avec le flux incident.

Probabilité de **réflexion (R)** et de **transmission (T)** :

Nous pouvons calculer le **courant J** en un point quelconque :

$$J(x) = -i \frac{\hbar}{2m} \left\{ \psi(x)^* \frac{d}{dx} \psi(x) - \psi(x) \frac{d}{dx} \psi(x)^* \right\}$$

Les solutions d'ondes planes sont utilisées pour décrire des courants stationnaires de particules. Pour évaluer les probabilités de réflexion et de transmission d'un tel faisceau, comparons les flux réfléchi et transmis avec le flux incident.

Particule incidente : $j_i = \frac{\hbar k_1}{m_1} A_1 A_1^* \Rightarrow j_i = \hbar v_1 |A_1|^2$

Particule réflexion : $j_r = \frac{\hbar k_1}{m_1} A'_1 A_1'^* \Rightarrow j_r = \hbar v_1 |A'_1|^2$

Courant transmis : $j_t = \frac{\hbar k_2}{m_2} A_2 A_2^* \Rightarrow j_t = \hbar v_2 |A_2|^2$

Le coefficient de transmission :

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{v_2 |A_2|^2}{v_1 |A_1|^2}$$

Le coefficient de réflexion :

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}$$

Les coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement donnés

$$j_i = |j_r| + j_t \quad \Rightarrow \quad T + R = 1$$

On remplace (II.5) et (II.6) dans Le coefficient de transmission et Le coefficient de réflexion trouve :

Les coefficients de réflexion :

$$R = \frac{v_2 |A_2|^2}{v_1 |A_1|^2}$$

On remplace (II.5) dans R :

$$R = \left(\frac{2v_1}{v_1 + v_2} \right)^2$$

Après la simplification

$$R = \frac{E(m_2 - m_1) + m_1 V_0}{E(m_2 + m_1) - m_1 V_0}$$

Les coefficients de transmission :

$$T = \frac{|A'_1|^2}{|A_1|^2}$$

En utilisant la relation (II.6) dans T :

$$T = \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2}$$

Après la simplification

$$T = \frac{\frac{4m_1}{m_2} \left[\frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[\frac{m_1}{m_2} \left(\frac{E}{V_0} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2}$$

Donc finalement :

Le coefficient de transmission ne tend pas vers l'unité quand l'énergie tend vers

L'infini, mais tend vers la valeur limite

$$\lim_{E \rightarrow \infty} T = \lim_{E \rightarrow \infty} \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2} \Rightarrow T = \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}$$

II.2. Graphes des coefficients de transmission Marche en potentiel et en masse de et leur analyse

Le première graphe (rouge) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 1$

Le deuxième graphe (marron) Pour $\frac{m_1}{m_2} = \frac{1}{12}$

Le troisième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 12$

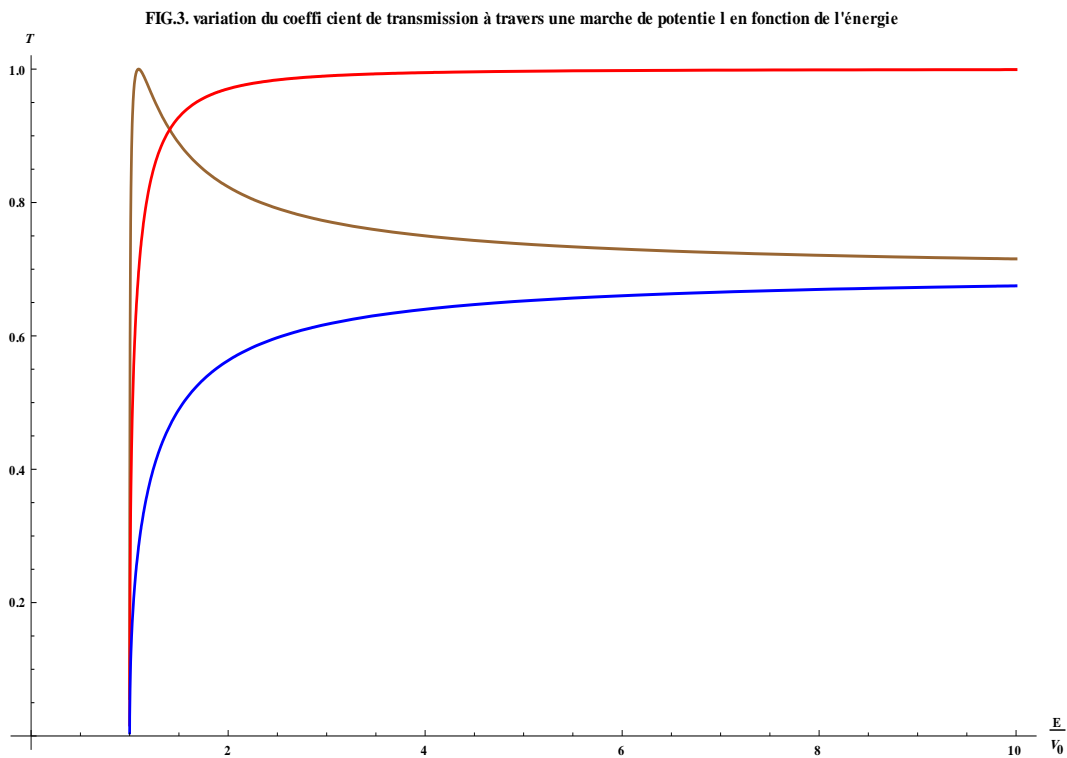


Figure (03) : Variation du coefficient de transmission à travers une marche de potentiel en fonction de l'énergie

Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$

Lorsque l'énergie augmente, le coefficient de transmission tend asymptotiquement

Vers l'unité. Ce comportement est physiquement plausible, et est cohérent avec le principe de conservation de la densité du courant de probabilité.

Pour $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{12}$

A partir de l'énergie $E=V_0$ le coefficient de transmission augmente très vite jusqu'à atteindre l'unité pour une énergie $E=6V_0/5$. Puis il diminue doucement jusqu'à la valeur asymptotique $T=\frac{\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1}+\sqrt{m_2})^2}$ qui est inférieure à l'unité.

Pour $\frac{m_2}{m_1}=12$

Le coefficient de transmission augmente plus lentement que dans les cas précédents, jusqu'à atteindre la valeur asymptotique T_l

II. 2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour un potentiel et une masse rectangulaires.

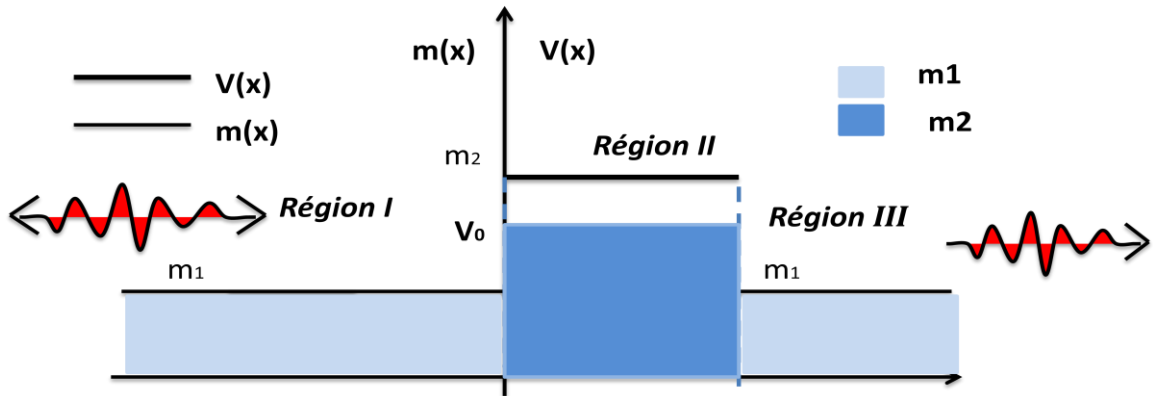


Figure (02)

Considérons une particule dans un barrière de potentiel $V(x)$ et une masse $m(x)$ rectangulaires.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{pour } (x < 0) & \text{Région I} \\ V_0 & \text{pour } (a > x > 0) & \text{Région II} \\ 0, & \text{pour } (x > a) & \text{Région III} \end{cases}$$

$$m(x) = \begin{cases} m_1, & \text{pour } (x < 0) & \text{Région I} \\ m_2 & \text{pour } (a > x > 0) & \text{Région II} \\ m_1, & \text{pour } (x > a) & \text{Région III} \end{cases}$$

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit :

$$H \psi(x) = E \psi(x)$$

Soit : $H = \frac{1}{4} [m(x)^\alpha P m(x)^\beta P m(x)^\gamma + m(x)^\gamma P m(x)^\beta P m(x)^\alpha]$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut - être écrite comme:

$$\left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} + \tilde{V}(x) - E \right\} \psi(x) = 0$$

La résolution d'équation de Schrödinger permet le calcul des fonctions d'onde dans chaque région de potentiel d'où l'on déduit le coefficient de transmission et de

réflexion. Il faut d'abord résoudre l'équation séparément à gauche et à droite de $x = 0$ et $x=l$ et puis raccorder les solutions en $x = 0$ et $x=a$ en utilisant des conditions de continuité.

I I.2.1. Solution dans la région I

Dans le cas $v(x)=0$

L'équation de Schrödinger dans la région I

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \right\} \psi(x) = 0$$

Avec ; $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right\} \psi(x) = 0$$

La solution générique dans la région I s'écrit :

$$\psi(x)_I = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

I I.2.2. Solution dans la région II

L'équation de Schrödinger dans la région II:

Dans la région II : $v(x)=V_0$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \right\} \psi(x) = 0$$

Avec ; $k_2^2 = \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2}$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k_2^2 \right\} \psi(x) = 0$$

La solution générique dans la région II s'écrit :

$$\psi(x)_{II} = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$

I I.2.3. Solution dans la région III

L'équation de Schrödinger dans la région III:

Dans le cas $v(x)=0$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \right\} \psi(x) = 0$$

Avec ; $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right\} \psi(x) = 0$$

La solution est de la forme:

$$\psi(x)_{\text{III}} = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}$$

Prenons $A'_3 = 0$ (Particule incidente venant de $x = -\infty$)

$$\psi(x)_{\text{III}} = A_3 e^{ik_1 x}$$

I I.2.4. Conditions de continuité

La continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée est :

$$\psi(x) \text{ et } \frac{1}{m} \frac{d\psi(x)}{dx} \text{ Continuité (choix de lévy_leblond)}$$

I I.2.4.1. Raccord des régions I et II

Les conditions de continuité en $x=0$

La continuité de la fonction et La continuité de la dérivée :

$$\begin{cases} \psi(0)_{\text{I}} = \psi(0)_{\text{II}} \\ \frac{1}{m_1} \psi(0)'_{\text{I}} = \frac{1}{m_2} \psi(0)'_{\text{II}} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + A'_1 = A_2 + A'_1 \\ \frac{ik_1}{m_1} (A_1 - A'_1) = \frac{ik_2}{m_2} (A_1 - A'_1) \end{cases}$$

Posons $v_i = \frac{k_i}{m_i}$

$$\begin{cases} A_1 + A'_1 = A_2 + A'_1 & (II.8) \\ A_1 - A'_1 = \frac{v_2}{v_1} (A_2 - A'_1) & (II.9) \end{cases}$$

I I.2.4.2. Raccord des régions II et III

Continuité de la fonction d'onde en $x=a$:

$$\psi(a)_{\text{II}} = \psi(a)_{\text{III}} \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}$$

Continuité de la dérivée e /masse en $x=l$

$$\frac{1}{m_2} \psi(0)'_{\text{II}} = \frac{1}{m_1} \psi(0)'_{\text{III}} \Rightarrow \frac{ik_2}{m_2} (A_2 - A'_2) = \frac{ik_1}{m_1} A_3$$

Alors

$$\begin{cases} A_1 e^{ik_2 a} + A'_1 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} & (II.10) \\ A_1 e^{ik_2 a} - A'_1 e^{-ik_2 a} = \frac{v_1}{v_2} A_1 e^{ik_1 a} & (II.11) \end{cases}$$

Avec addition (II.8) et (II.9) nous avons l'équation (II.12) et nous avons l'équation (II.13) de la soustraction de (II.8) de (II.9).

$$\begin{cases} A_1 = \left(\frac{v_1+v_2}{2v_1} \right) A_2 + \left(\frac{v_1-v_2}{2v_1} \right) A_2' & (II.12) \\ A_1' = \left(\frac{v_1-v_2}{2v_1} \right) A_2 + \left(\frac{v_1+v_2}{2v_1} \right) A_2' & (II.13) \end{cases}$$

En addition (II.10) à (II.11) nous avons eu la relation (II.14) et nous avons eu l'équation (II.15) de la soustraction de (II.10) de (II.11).

$$\begin{cases} A_2 = \left(\frac{v_1+v_2}{2v_1} \right) A_3 e^{i(k_1-k_2)a} & (II.14) \\ A_2' = \left(\frac{v_1-v_2}{2v_1} \right) A_3 e^{i(k_1+k_2)a} & (II.15) \end{cases}$$

En remplaçant (II.14) et (II.15) dans (II.12) on obtient:

$$\begin{aligned} A_1 = & \left(\frac{v_1+v_2}{2v_1} \right) \left(\frac{v_1+v_2}{2v_1} \right) A_3 e^{i(k_1-k_2)a} \\ & + \left(\frac{v_1-v_2}{2v_1} \right) \left(\frac{v_1-v_2}{2v_1} \right) A_3 e^{i(k_1+k_2)a} \end{aligned}$$

Ce qui nous mène au résultat suivant :

$$A_3 = \frac{4v_1v_2 e^{-ik_1a}}{(v_1+v_2)^2 e^{-ik_2a} - (v_1-v_2)^2 e^{ik_1a}} A_1$$

I I.2.5. Coefficient de transmission.

On introduit le coefficient de transmission T de la barrière

$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$ car dans la région (I) et (III) du même vecteur d'onde Ce qui conduit à :

$$T = \left| \frac{4v_1v_2 e^{-ik_1a}}{(v_1+v_2)^2 e^{-ik_2a} - (v_1-v_2)^2 e^{ik_2a}} \right|^2$$

Si $E < V_0$ on a $k_2 = \pm i\tilde{k}_2$

$$T = \left| \frac{4v_1v_2 e^{-ik_1a}}{(v_1+v_2)^2 e^{\tilde{k}_2 ik_2a} - (v_1-v_2)^2 e^{-\tilde{k}_2 a}} \right|^2$$

Si $E > V_0$

$$T = \frac{(4v_1v_2)^2}{(v_1+v_2)^4 - (v_1-v_2)^4 - 2(v_1+v_2)^2(v_1-v_2)^2 \cos(2k_2a)}$$

Après la simplification nous obtenons le coefficient ci-dessous :

$$T = \frac{1}{\left(1 - \frac{m_2}{m_1} \frac{E}{V_0} - 1\right)^2 \sin^2\left(m_2 \left(\frac{E}{V_0} - 1\right) a\right) + \frac{m_2}{m_1} \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}$$

II.2.6. Graphes des coefficients de transmission pour un potentiel et une masse rectangulaires

Le premier graphe (rouge) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 1$

Le deuxième graphe (marron) Pour $\frac{m_1}{m_2} = \frac{1}{12}$

Le troisième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 12$

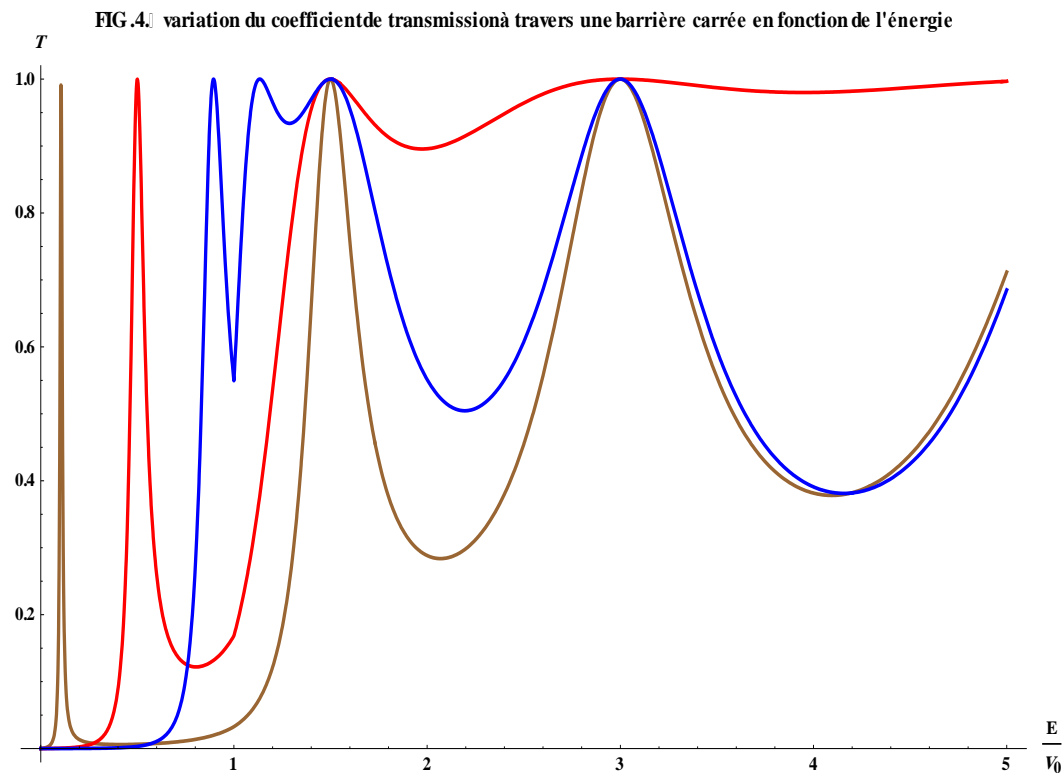


Figure (04) : Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel et masse en fonction de l'énergie

Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$

Pour $E < V_0$ on observe un effet tunnel. Pour $E > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations "amorties" très rapides. Pratiquement la transmission est complète déjà à partir de la valeur $E = 6V_0$.

Pour $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{12}$

Pour $E < V_0$ on observe un effet tunnel. Pour $E > V_0$, le coefficient de transmission

oscille lentement entre la valeur minimale et l'unité. Plus l'énergie augmente et plus les minima du coefficient de transmission augmentent. On retrouve bien l'analogie avec la transmission optique d'un interféromètre de Fabry – Pérot.

Pour $\frac{m_2}{m_1} = 12$

Le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale $T = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}$ et l'unité. Plus l'énergie augmente et plus les minima du coefficient de transmission diminuent. De nouveau cela illustre bien l'analogie avec la transmission optique d'un interféromètre de Fabry – Pérot.

Chapitre III

Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale

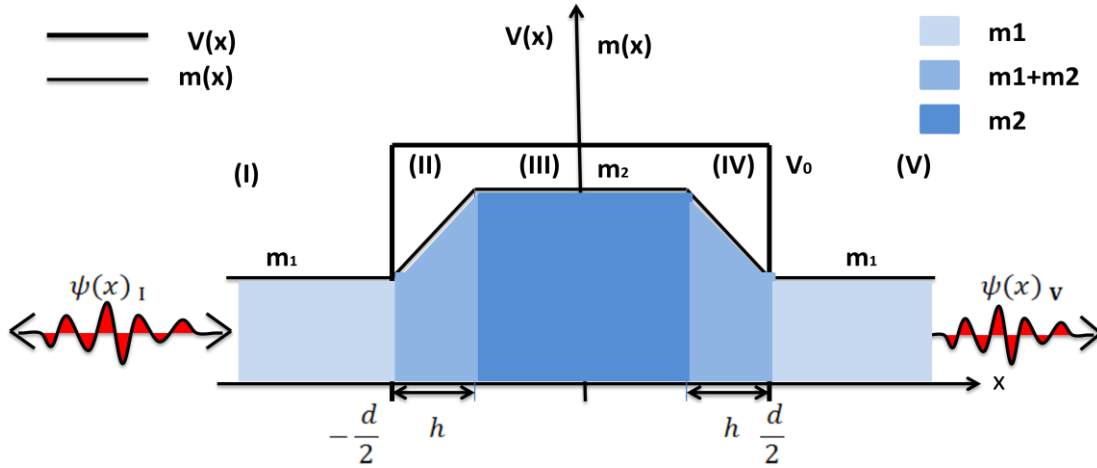


Figure (03)

La Hamiltonien généralisée s'écrit ;

$$\mathbf{H} = \frac{1}{4} [m(x)^\alpha P m(x)^\beta P m(x)^\gamma + m(x)^\gamma P m(x)^\beta P m(x)^\alpha] + V(x)$$

Pour le paramètres d'ambiguïté devaient prendre les valeurs

$$\beta = -1 \quad \text{et} \quad \alpha = \gamma = 0 \quad (\text{Choix de Ben Daniel et Duke [33]})$$

La Hamilton généralisé est :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{4} [P m(x)^\beta P + P m(x)^\beta P] = \frac{1}{2} P m(x)^\beta P$$

$$P = -i \frac{d}{dx}$$

L'équation de Schrödinger généralisé avec la masse dépendent de la position

$$\left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + E - v(x) \right\} \psi(x) = 0$$

Il est facile de prouver que l'équation de Schrödinger peut être écrite comme :

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{m'(x)}{m(x)} \frac{d}{dx} + 2m(x)(E - v(x)) \right\} \psi(x) = 0$$

Considérons une distribution de potentiel et de masse définie comme :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < -\frac{d}{2}) \text{ Région (I)} \\ V_0 & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \text{ Région (II)} \\ 0 & (x > \frac{d}{2}) \text{ Région (III)} \end{cases}$$

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & (x < -\frac{d}{2}) \text{ Région (I)} \\ (\frac{m_2 - m_1}{h})(x + \frac{d}{2}) + m_1 & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{d}{2} + h) \text{ Région (II)} \\ m_2 & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \text{ Région (III)} \\ (\frac{m_2 - m_1}{h})(-x + \frac{d}{2}) + m_1 & (\frac{d}{2} - h < x < \frac{d}{2}) \text{ Région (IV)} \\ m_1 & (x > \frac{d}{2}) \text{ Région (V)} \end{cases}$$

La résolution d'équation de Schrödinger permet le calcul des fonctions d'onde dans chaque région de potentiel d'où l'on déduit le coefficient de transmission et de réflexion. Il faut d'abord résoudre l'équation séparément à gauche et à droite et puis raccorder les solutions en utilisant des conditions de continuité.

III.1.1 Solution dans la région I

Nous avons : $V(x) = 0$ et $m(x) = m_1$

L'équation aux valeurs propres dans la **région I** est :

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + 2m_1 E \right\} \psi(x) = 0$$

Et avec ; $k_1^2 = 2m_1 E$

La solution générique dans la **région I** s'écrit :

$$\psi(x)_I = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (\text{III.1.1})$$

III.1.2 Solution dans la région II

On a : $V(x) = V_0$ et $m(x) = (\frac{m_2 - m_1}{h})(x + \frac{d}{2}) + m_1$

Avec : $\frac{d}{dx} m(x) = \frac{m_2 - m_1}{h}$

Où l'on a posé : $m(x) = A(x + L) +$

$$A = \frac{m_2 - m_1}{h} \quad \text{et} \quad L = \frac{d}{2} + \frac{h m_1}{m_2 - m_1}$$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{(x+L)} \frac{d}{dx} + 2A(x+L)(E - V_0) \right\} \psi(x) = 0$$

On pose: $y = x + L$

On peut l'écrire ainsi

$$\left\{ \frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{y} \frac{d}{dy} + 2A(E - V_0)y \right\} \psi(y) = 0$$

$$k_2^2 = 2A(E - V_0)$$

L'équation devient de la forme:

$$\left\{ \frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{y} \frac{d}{dy} + k_2^2 y \right\} \psi(y) = 0$$

La solution de l'équation de Schrödinger, dans la région (II) est :

$$\psi(y)_{II} = A_2 \text{Ai}'(-k_2^{2/3}y) + A_2 \text{Bi}'(-k_2^{2/3}y) \quad (\text{III.1.2})$$

III.1.1 Solution dans la région III

Nous avons : $V(x) = V_0$ et $m(x) = m_2$

L'équation aux valeurs propres dans la région I est :

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + 2m_2(E - V_0) \right\} \psi(x) = 0$$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k_3^2 \right\} \psi(x) = 0$$

Et avec ; $k_3^2 = 2m_2(E - V_0)$

La solution générale est :

$$\psi(x)_{III} = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x} \quad (\text{III.1.3})$$

III.1.4 Solution dans la région IV.

On a: $V(x) = V_0$ et $m(x) = \left(\frac{m_2 - m_1}{h}\right) \left(-x + \frac{d}{2}\right) + m_1$

Avec : $\frac{d}{dx} \partial_x m(x) = -\left(\frac{m_2 - m_1}{h}\right)$

Où l'on a posé : $m(x) = A(-x + L)$

$$A = \frac{m_2 - m_1}{h} \quad \text{et} \quad L = \frac{d}{2} + \frac{hm_1}{m_2 - m_1}$$

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{(-x + \frac{d}{2})} \frac{d}{dx} + 2A(E - V_0)(-x + \frac{d}{2}) \right\} \psi(x) = 0$$

on posé: $\tilde{y} = (-x + \frac{d}{2}) \quad \frac{d}{dx} = -\frac{d}{d\tilde{y}} \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{d\tilde{y}^2}$

On peut l'écrire ainsi

$$\left\{ \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} - \frac{1}{\tilde{y}} \frac{d}{d\tilde{y}} + 2A(E - V_0) \tilde{y} \right\} \psi(\tilde{y}) = 0$$

$$k_2^2 = 2A(E - V_0)$$

L'équation devient de la forme:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} - \frac{1}{\tilde{y}} \frac{d}{d\tilde{y}} + k_2^2 \tilde{y} \right\} (\tilde{y}) = 0$$

La solution de l'équation de Schrödinger, dans la région (IV) est :

$$\psi(x)_{IV} = A_4 \text{Ai}'(-k_2^{2/3} \tilde{y}) + A_4' \text{Bi}'(-k_2^{2/3} \tilde{y}) \quad (\text{III.1.4})$$

III.1.5 Solution dans la région V

Nous avons : $V(x) = 0$ et $m(x) = m_1$

L'équation aux valeurs propres dans la région I est :

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + 2m_1 E \right\} \psi(x) = 0$$

Et avec ; $k_1^2 = 2m_1 E$

La solution générale dans la **région V** s'écrit :

$$\psi(x)_V = A_5 e^{ik_1 x} + A_5' e^{-ik_1 x}$$

$A_5' = 0$ Car il n'y a pas d'onde qui vient de $+\infty$

Dans ce cas, la solution est de la forme :

$$\psi(x)_V = A_5 e^{ik_1 x} \quad (\text{III.1.5})$$

III.2. Conditions de continuité :

Les conditions de raccordement aux interfaces doivent être la continuité de la

fonction d'onde et de sa dérivée divisée par la masse.

Pour une hétérostructure abrupte les conditions de continuité sont prises de [33]

$m(x)^\alpha \psi(x)$ et $m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\alpha \psi(x)$ Continuité

$\alpha = 0$ et $\beta = -1$ $\psi(x)$ et $m(x)^{-1} \frac{d\psi(x)}{dx}$ Continuité

III.2.1. Raccord régions II et I

Raccordements des fonctions au point $x = -\frac{d}{2} \Rightarrow y = g$

$$g = \frac{hm_1}{m_2 - m_1} \quad \text{et} \quad m\left(-\frac{d}{2}\right) = m_1$$

Continuité de la fonction:

$$\psi\left(-\frac{d}{2}\right)_I = \psi\left(-\frac{d}{2}\right)_II$$

Maintenant

$$A_1 e^{-ik_1 \frac{d}{2}} + A_1' e^{ik_1 \frac{d}{2}} = A_2 \text{Ai}'(-k_2^{2/3} g) + A_2 \text{Bi}'(-k_2^{2/3} g) \quad (\text{III.2.1})$$

Continuité de la dérivée :

$$\frac{1}{m(x)} \psi\left(-\frac{d}{2}\right)_I = \frac{1}{m(x)} \psi\left(-\frac{d}{2}\right)_II$$

$$\frac{1}{m_1} \frac{d}{dx} (A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}) = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dx} (A_2 \text{Ai}'(-k_2^{2/3} y) + A_2' \text{Bi}'(-k_2^{2/3} y))$$

Maintenant

$$A_1 e^{-ik_1 \frac{d}{2}} - A_1' e^{ik_1 \frac{d}{2}} = \frac{k_2^{4/3} g}{ik_1} \{A_2 \text{Ai}(-k_2^{2/3} g) + A_2' \text{Bi}(-k_2^{2/3} g)\} \quad (\text{III.2.2})$$

III.2.1 Raccord régions II et III

Raccordements des fonctions au point $x = -\frac{d}{2} + h \Rightarrow y = f$

$$f = \frac{hm_2}{m_2 - m_1}$$

$$m\left(-\frac{d}{2} + h\right) = m_2$$

$$A_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} + A_3' e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} = A_2 \text{Ai}'(-k_2^{2/3} f) + A_2' \text{Bi}'(-k_2^{2/3} f) \quad (\text{III.2.3})$$

Continuité de la dérivée :

$$\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi\left(-\frac{d}{2} + h\right)_II = \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi\left(-\frac{d}{2} + h\right)_III$$

$$\frac{d}{dx} [A_2 \text{Ai}'(-k_2^{\frac{2}{3}} y) + A_2' \text{Bi}'(-k_2^{\frac{2}{3}} y)] = \frac{d}{dx} (A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x})$$

Maintenant

$$\frac{k_2^{4/3} f}{ik_3} \{A_2 \text{Ai}(-k_2^{2/3} f) + A_2' \text{Bi}(-k_2^{2/3} f)\} = A_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} - A_3' e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} \quad (\text{III.2.4})$$

III.2.3 Raccord régions III et IV

le raccordement de la fonction d'onde au point : $x = \frac{d}{2} - h$

$$\tilde{y} = f \quad \text{et} \quad f = \frac{hm_2}{m_2 - m_1}$$

$$m \left(-\frac{d}{2} + h \right) = m_2$$

, nous arrivons aux systèmes d'équations suivantes :

$$A_3 e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)} + A_3' e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)} = A_4 \text{Ai}'(-k_2^{\frac{2}{3}} f) + A_4' \text{Bi}'(-k_2^{\frac{2}{3}} f) \quad (\text{III.2.5})$$

Continuité de la dérivée: $\frac{1}{m(x)} \partial_x \psi(\frac{d}{2} - h)_{\text{III}} = \frac{1}{m(x)} \partial_x \psi(\frac{d}{2} - h)_{\text{IV}}$

$$\partial_x (A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}) = \partial_x \left(A_4 \text{Ai}'(-k_2^{\frac{2}{3}} \tilde{y}) + A_4' \text{Bi}'(-k_2^{\frac{2}{3}} \tilde{y}) \right)$$

Donc on va décrire la relation sous forme :

$$A_3 e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)} - A_3' e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)} = \frac{k_2^{4/3} f}{ik_3} \left(A_4 \text{Ai}(-k_2^{\frac{2}{3}} f) + A_4' \text{Bi}(-k_2^{\frac{2}{3}} f) \right) \quad (\text{III.2.6})$$

III.2.4 Raccord régions IV et V

Raccordements des fonctions d'ondes par continuité de la fonction et de sa dérivée

au point

$$(x = \frac{d}{2} \Rightarrow \tilde{y} = g)$$

$$g = \frac{hm_1}{m_2 - m_1}$$

La continuité de la fonction:

$$\psi(x)_{\text{IV}} = \psi(x)_{\text{V}}$$

Maintenant

$$A_4 \text{Ai}'\left(-k_2^{\frac{2}{3}} g\right) + A_4' \text{Bi}'\left(-k_2^{\frac{2}{3}} g\right) = A_5 e^{ik_1 x}$$

(III.2.7)

Continuité de la dérivée : $\frac{1}{m(x)} \psi(\frac{d}{2})_{IV} = \frac{1}{m(x)} \psi(\frac{d}{2})_V$

$$\frac{d}{dx} (A_4 \text{Ai}'(-k_2^{\frac{2}{3}} \tilde{y}) + A_4' \text{Bi}'(-k_2^{\frac{2}{3}} \tilde{y})) = \frac{d}{dx} (A_5 e^{ik_1 x})$$

Maintenant

$$A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} = \frac{k_2^{4/3} g}{ik_1} (A_4 \text{Ai}(k_2^{4/3} g) + A_4' \text{Bi}(k_2^{4/3} g)) \quad (\text{III.2.8})$$

III.3. Coefficients de transmission et de réflexion

Les conditions de raccordement conduisent au système :

Dans le but de simplifier

$$\chi_1 = -k_2^{2/3} g \quad \chi_2 = -k_2^{3/2} f$$

$$\xi_1 = \frac{k_2^{4/3} g}{ik_1} \quad \xi_2 = \frac{k_2^{4/3} f}{ik_3}$$

$$A_1 e^{-ik_1 \frac{d}{2}} + A_1' e^{ik_1 \frac{d}{2}} = A_2 \text{Ai}'(\chi_1) + A_2 \text{Bi}'(\chi_1) \quad (\text{III. 2.1})$$

$$A_1 e^{-ik_1 \frac{d}{2}} - A_1' e^{ik_1 \frac{d}{2}} = \xi_1 (A_2 \text{Ai}(\chi_1) + A_2' \text{Bi}(\chi_1)) \quad (\text{III. 2.2})$$

$$A_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} + A_3' e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} = A_2 \text{Ai}'(\chi_2) + A_2' \text{Bi}'(\chi_2) \quad (\text{III. 2.3})$$

$$A_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} - A_3' e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} = \xi_2 (A_2 \text{Ai}(\chi_2) + A_2' \text{Bi}(\chi_2)) \quad (\text{III. 2.4})$$

$$A_3 e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)} + A_3' e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)} = A_4 \text{Ai}'(\chi_2) + A_4' \text{Bi}'(\chi_2) \quad (\text{III. 2.5})$$

$$A_3 e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)} - A_3' e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)} = \xi_2 (A_4 \text{Ai}(\chi_2) + A_4' \text{Bi}(\chi_2)) \quad (\text{III. 2.6})$$

$$A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} = A_4 \text{Ai}'(\chi_1) + A_4' \text{Bi}'(\chi_1) \quad (\text{III. 2.7})$$

$$A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} = \xi_1 (A_4 \text{Ai}(\chi_1) + A_4' \text{Bi}(\chi_1)) \quad (\text{III. 2.8})$$

Nous avons dans ce système huit équations et neuf coefficients, alors on peut calculer la valeur de A_1 en fonction de A_5 dans le but de trouver le coefficient de transmission.

Par ailleurs, nous avons :

$$(\text{III.2.7}) = (\text{III.2.8})$$

$$A_4 = \mathcal{M}_1 A_4' \quad \text{Pour avoir: } A_4' = \frac{1}{\mathcal{M}_1} A_4 \quad (\text{III.2.9})$$

Dans le but de simplifier, nous avons mis:

$$\mathcal{M}_1 = \frac{\xi_1 \text{Bi}(\chi_1) - \text{Bi}'(\chi_1)}{\text{Ai}'(\chi_1) - \xi_1 \text{Ai}(\chi_1)}$$

En utilisant les relations (III.2.9) et (III.2.7), on trouve :

$$A_4 = \mathcal{M}_2 A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} \quad (\text{III.2.10})$$

$$A_4' = \frac{\mathcal{M}_2}{\mathcal{M}_1} A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} \quad (\text{III.2.11})$$

$$\mathcal{M}_2 = \frac{e^{ik_1 \frac{d}{2}}}{(\text{Ai}'(\chi_1) + \frac{1}{\mathcal{M}_1} \text{Bi}'(\chi_1))}$$

En additionnant ((III.2.5)) à (III.2.6) nous avons l'équation suivante :

$$2A_3 e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)} = A_4 [\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + A_4' [\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)]$$

En faisant la soustraction de (III.2.6) de (III.2.5), nous avons l'équation suivante:

$$2A_3' e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)} = A_4 [\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + A_4' [\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)]$$

On substitue (III.2.11) et (III.2.10) dans les deux équations précédentes pour trouver:

$$A_3 = \mathcal{M}_3 A_5 \quad (\text{III.2.12})$$

$$\mathcal{M}_3 = \frac{\mathcal{M}_2}{2} [\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + \frac{1}{\mathcal{M}_1} (\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)}$$

$$A_3' = \mathcal{M}_4 A_5 e^{i(k_1 \frac{d}{2} + k_3(\frac{d}{2}-h))} \quad (\text{III.2.13})$$

$$\mathcal{M}_4 = \frac{\mathcal{M}_2}{2} [\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + \frac{1}{\mathcal{M}_1} (\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)}$$

En additionnant (III.2.3) à (III.2.4) nous avons:

$$2A_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} = A_2 (\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)) + A_2' (\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)). \quad (\text{III.2.14})$$

Substitue (III.2.3) à (III.2.4) nous avons eu la relation (III.2.12)

$$2A_3' e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} = A_2 (\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)) + A_2' (\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) \quad (\text{III.2.15})$$

On substitue (III.2.12) et (III.2.13) dans (III.2.14) et (III.2.15) on trouve:

$$2A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} = [A_2 (Ai'(\chi_2) + \xi_2 Ai(\chi_2)) + A_2' (Bi'(\chi_2) + \xi_2 Bi(\chi_2))] \frac{1}{\mathcal{M}_3} e^{-i2k_3 \left(\frac{d}{2} - h\right)} \quad (\text{III. 2.14})$$

$$2A_5 e^{ik_1 \frac{d}{2}} = [A_2 (Ai'(\chi_2) - \xi_2 Ai(\chi_2)) + A_2' (Bi'(\chi_2) - \xi_2 Bi(\chi_2))] \frac{1}{\mathcal{M}_4} e^{i2k_3 \left(\frac{d}{2} - h\right)} \quad (\text{III. 2.15})$$

Donc : (III. 2.14) = (III. 2.15)

$$A_2 = \mathcal{M}_5 A_2' \quad A_2' = \frac{1}{\mathcal{M}_5} A_2 \quad (\text{III.2.16})$$

$$\mathcal{M}_5 = \frac{[\mathcal{M}_3 e^{ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)} (Bi'(\chi_2) - \xi_2 Bi(\chi_2)) - \mathcal{M}_4 e^{-ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)} (Bi'(\chi_2) + \xi_2 Bi(\chi_2))] }{[\mathcal{M}_4 e^{-ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)} (Ai'(\chi_2) + \xi_2 Ai(\chi_2)) - \mathcal{M}_3 e^{ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)} (Ai'(\chi_2) - \xi_2 Ai(\chi_2))]}$$

On substitue (III.2.16) dans (III.2.14) et (III.2.15) on trouve :

$$A_2 = \mathcal{M}_6 A_5 \quad (\text{III.2.17})$$

$$\mathcal{M}_6 = \frac{2\mathcal{M}_3 e^{ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)}}{[(Ai'(\chi_2) + \xi_2 Ai(\chi_2)) + \frac{1}{\mathcal{M}_5} (Bi'(\chi_2) + \xi_2 Bi(\chi_2))]}$$

$$A_2' = \mathcal{M}_7 A_5 \quad (\text{III.2.18})$$

$$\mathcal{M}_7 = \frac{2\mathcal{M}_3 e^{-ik_3 \left(-\frac{d}{2} + h\right)}}{[\mathcal{M}_5 (Ai'(\chi_2) - \xi_2 Ai(\chi_2)) + (Bi'(\chi_2) - \xi_2 Bi(\chi_2))]}$$

En additionnant (III.2.1) à (III.2.2) nous avons:

$$A_1 = [A_2 (Ai'(\chi_1) + \xi_1 Ai(\chi_1)) + A_2' (Bi'(\chi_1) + \xi_1 Bi(\chi_1))] e^{ik_1 \frac{d}{2}}$$

En faisant la soustraction de (III.2.2) de (III.2.1) il nous résulte:

$$A_1' = [A_2 (Ai'(\chi_1) - \xi_1 Ai(\chi_1)) + A_2' (Bi'(\chi_1) - \xi_1 Bi(\chi_1))] e^{-ik_1 \frac{d}{2}}$$

En utilisant la relation (16) dans A_1 et A_1'

$$A_1 = A_5 [\mathcal{M}_6 (Ai'(\chi_1) + \xi_1 Ai(\chi_1)) + \mathcal{M}_7 (Bi'(\chi_1) + \xi_1 Bi(\chi_1))] e^{-ik_1 \frac{d}{2}} \quad (\text{III.2.19})$$

$$T = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 \Rightarrow T = \left| \frac{1}{\mathcal{M}_6(\text{Ai}'(\chi_1) + \xi_1 \text{Ai}(\chi_1)) + \mathcal{M}_7(\text{Bi}'(\chi_1) + \xi_1 \text{Bi}(\chi_1))e^{+ik_1 \frac{d}{2}}} \right|^2$$

III.4. Graphes des coefficients de transmission en potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale de et leur analyse

Pour une masse continue trapézoïdale, le coefficient de transmission oscille d'une manière chaotique pour énergies.

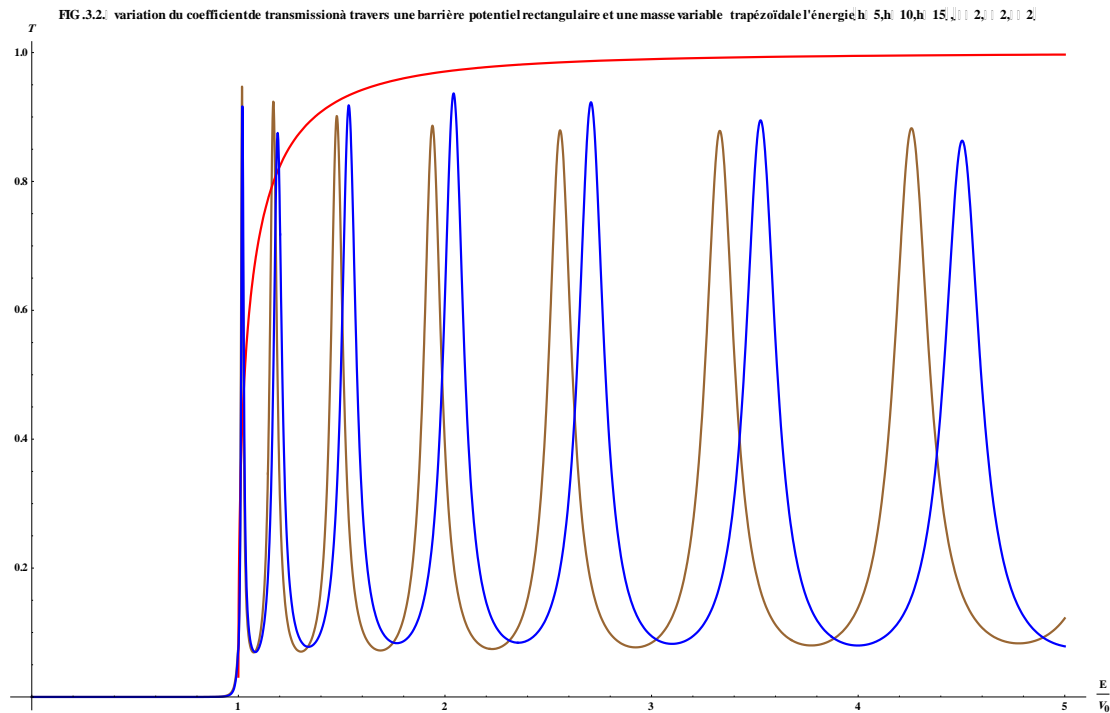


Figure (05) : Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale

Courbe de coefficient d'électrons de transmission en termes de masse et la dimension h

Le première graphe (rouge) Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$ $h=0$

Pour($E > V_0$), quand l'énergie augmente, le coefficient de transmission tend asymptotiquement vers l'unité de façon monotone, dans ce cas, il n'y a pas d'oscillations puisque il n'existe pas d'interférence.

Le deuxième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 0.2$ $h=5$

Pour($E > V_0$), et pour des petites énergies le coefficient de transmission oscille d'une manière chaotique, atteignant quelquefois l'unité.

Puis à partir d'une énergie 5 fois le potentiel V_0 , son comportement est plus chaotique.

Le troisième graphe (marron) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 20$ $h=5$

Pour $E > V_0$, Le coefficient de transmission oscille régulièrement entre l'unité et une fonction enveloppe inférieure Le coefficient de transmission augmente lentement que dans les cas précédents, jusqu'à atteindre la valeur asymptotique 0.6

Conclusion:

De toutes les observations que l'on a faites, il s'avère que le choix du paramètre h est le plus apte pour donner des résultats proches de la réalité physique.

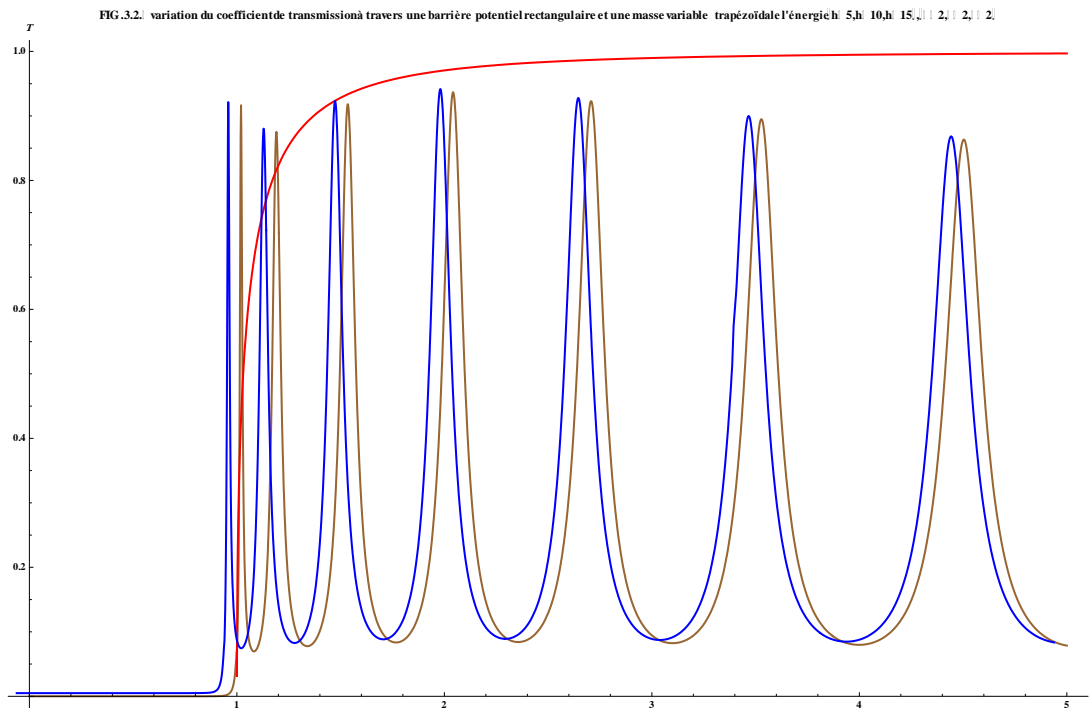


Figure (06) : Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale

Courbe de coefficient d'électrons de transmission en termes de masse et la dimension h

Le première graphe (rouge) Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$ $h=0$

Le deuxième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 0.2$ $h=10$

Le troisième graphe (marron) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 20$ $h=10$

En comparant les coefficients de transmission pour masse variable et $h=15$

On observe le coefficient de transmission oscille en atteignant l'unité pour des valeurs particulières de l'énergie.

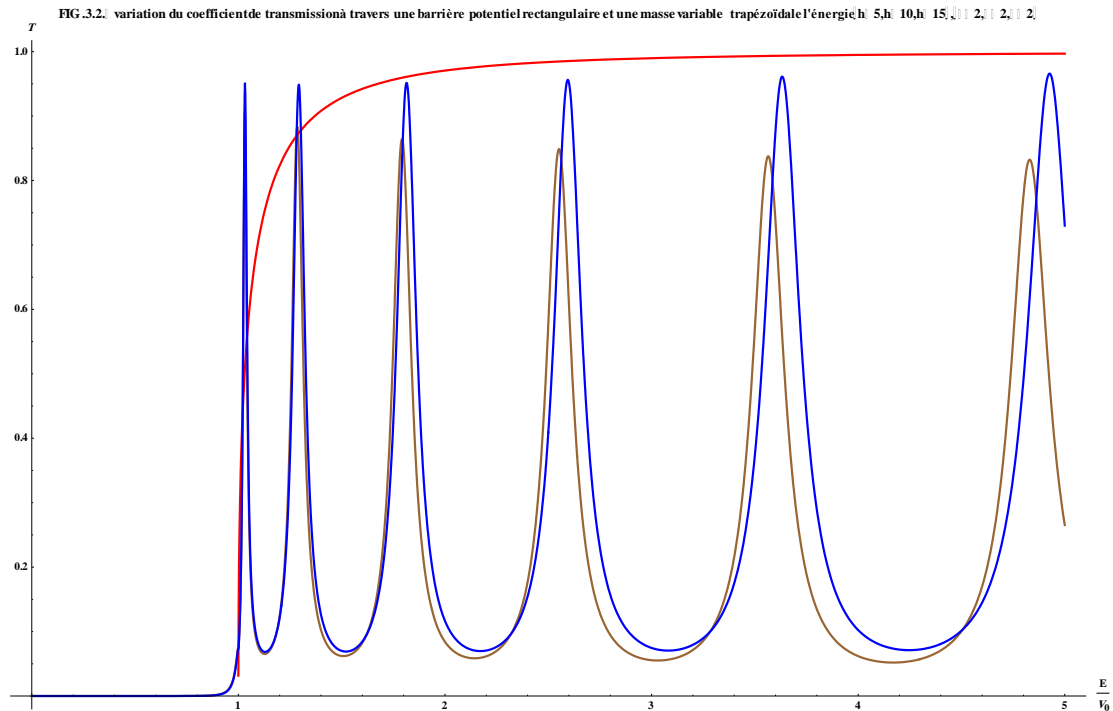


Figure (07) : Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale

Le première graphe (rouge) Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$ $h=0$

Le deuxième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 0.2$ $h=15$

Le troisième graphe (marron) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 20$ $h=15$

Pour ($E > V_0$) Quand l'énergie augmente, le coefficient de transmission ne tend pas vers l'unité mais oscille indéfiniment entre l'unité et une valeur inférieure très basse. Les deux courbes sont superposées en ayant des valeurs supérieures identiques égales à l'unité et des valeurs inférieures identiques aussi.

Conclusion:

A la suite de cette comparaison entre une masse discontinue rectangulaire, et une masse continue trapézoïdale on peut émettre les observations suivantes :

- 1- on remarque qu'il y a effet tunnel que dans les deux configurations de h .
- 2- on observe que pour le deux configurations les maxima du coefficient de transmission sont égaux à l'unité.
- 3- De toutes les observations que l'on a faites, il s'avère que le choix du paramètre h est le plus apte pour donner des résultats proches de la réalité physique.

CONCLUSION

Le sujet de ce mémoire s'articule sur l'approche de la mécanique quantique pour résoudre l'équation de Schrödinger associée à certains problèmes à une dimension avec masse dépendante de la position (**PDM**). Bien que d'autres approches soient aussi efficaces dans l'étude des systèmes quantiques avec masses variables dans l'espace, l'approche de hamiltonien généralisé sa manière algébrique qui est à la fois simple et élégante pour la détermination de l'équation de Schrödinger généralisé avec la masse dépendent de la position.

Dans le but d'étudier les influences de la forme de la masse, du potentiel, et du choix des paramètres d'ambiguïté, nous avons représenté les graphes des coefficients de transmission en fonction de l'énergie, et ce pour différentes configurations de masses et de potentiels. Après avoir analysé et fait l'étude comparative, on est arrivé au résultat que dans le cas de la masse continue, le coefficient de transmission

Dans le chapitre II nous donnons un rappel historique sur les travaux les plus importants réalisés par les auteurs dans ce domaine, ainsi que les valeurs proposées pour les paramètres d'ambiguïté (α, β, γ) , et déduite l'équation de Schrödinger généralisé par l'hamiltonien effectif généralisé pour une potentiel et la masse variable en fonction de la position

Dans le chapitre II nous donnons étudiant le passage à la limite d'une masse en marche abrupte, nous avons obtenu une première restriction sur le choix des paramètres d'ambiguïté. Ce qui nous sera très utile pour l'étude des cas plus complexes. Ensuite, nous avons abordé le cas d'un Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel rectangulaire et marche en potentiel et en masse une et masse variable rectangulaires. En usant de la restriction sur les paramètres d'ambiguïté trouvée, nous avons été en mesure de calculer analytiquement les fonctions d'onde ainsi que les coefficients de transmission et de réflexion.

Dans le chapitre III nous donnons étudiant le passage à la limite Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale. Calcul analytique des fonctions d'onde et des coefficients de transmission.

Bibliographie

- [1] G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure, 1988, Les Ulis: Editions de Physique.
 - [2] P. Ring and P. Shuck, The Nuclear Many-Body Problem (Springer-Verlag, NewYork, 1980).
 - [3] Puente A. and Casas M., non local energy density functional for atoms and Metal clusters, Computational Material Science 2, 441- 449 (1994).
 - [4] Puente A., A. Serra and Casas M., Dipole excitation of Na clusters with a non-localenergy density functional, Zeitschrift für Physik D 31, 283-286 (1994).
 - [5] L. I. Serra and E. Lipparini, Spin response of unpolarized quantum dots, Europhys.Lett. 40, 667-672 (1997).
 - [6] M. Barranco, M. Pi, S. M. Gatica, E. S. Hernandez and J. Navarro, Structure and energetics of mixed He^3 He^4 drops, Phys. Rev. B 56, 8997–9003 (1997)
 - [7] Wu J., Alhassid Y. and Gursev F., Group theory approach to scattering. IV. Solvable potentials associated with $\text{SO}(2, 2)$, Ann. Phys. 196, 163–181 (1989).
 - [8] Wu J., Alhassid Y., The potential group approach and hypergeometric Differential equations, J. Math. Phys. 31, 557-562 (1990)
 - [9] Levai G., Solvable potentials associated with $\text{SU}(1, 1)$ algebras: a systematic study, J.Phys. A: Math. Gen. 27, 3809-3828 (1994).
 - [10] K. C. Yung and J. H. Yee, Derivation of the modified Schrödinger equation for a particle with spatially varying mass through path integrals, Phys. Rev. A 50, 104-106(1994)
 - [11] L. Chetouani, L. Dekar and T. F. Hammann, Green's functions via path integrals for systems with position-dependent masses, Phys. Rev. A 52, 82-91 (1995).
-

Bibliographie

- [12] L. Dekar, étude quantique de modèles avec potentiels et masses spatio-dependents de types constants par morceaux et de types marches douces,
 - [13] E. Witten, Supersymmetric grand unified theories and the early universe, Nucl. Phys, B185 (1981)513.
 - [14] A. R. Plastino, A. Rigo, M. Casas, F. Garcias and A. Plastino, Supersymmetric approach to quantum systems with position-dependent effective mass, Phys. Rev. A 60, 4318–4325 (1999).
 - [15] C. Tezcan, Ramazan Sever, Exact solutions of the Schrödinger equation with position -dependent effective mass via general point canonical transformation, J Math Chemistry, Vol. 42, No. 3, 387 -395(2007).
 - [16] G. Levai, A search for shape-invariant solvable potentials J. Phys. A: Math. Gen. 22,689-702 (1989)
 - [17] O. Von Roos, Position-dependent effective masses in semiconductor theory, Phys. Rev. B 27, 7547–7552 (1983)
 - [18] T. Gora, F. Williams, Theory of Electronic States and Transport in Graded Mixed Semiconductors, Phys. Rev. 177, 1179–1182 (1969)
 - [19] D.J. Ben Daniel, C.B. Duke, Space-Charge Effects on Electron Tunneling, Phys. Rev. 152, 683–692 (1966)
 - [20] Qi-Gao Zhu and H. Kromer, Interface connection rules for effective-mass wave functions at abrupt heterojunction between two different semiconductors, Phys. Rev. B 27, 3519–3527 (1983).
 - [21] D. J. BenDaniel and C. B. Duke, Phys. Rev., 152, 683 (1966).
 - [22] T. Gora and F. William, Phys. Rev. 177, 1179 (1969).
 - [23] Q. G. Zhu and H. Kroemer, Phys. Rev, B 27, 3519 (1983).
 - [24] R. A. Morrow and K. R. Brownstein, Phys. Rev, B 30, 678 (1984).
-

Bibliographie

- [25] R. A. Morrow, Phys. Rev. B 35, 8074 (1987).
 - [26] J. Thomsen, G. T. Einevoll and P. C. Hemmer, Phys-Rev. B 39, (1989).
 - [27] T. Li and K.J. Kuhn, Phys. Rev.B 47, 12760 (1993).
 - [28] O. Mustafa and S.H. Mazharimousavi, Int. J. Theor. Phys., 46, (2007).
 - [29] O. Mustafa and S. H. Mazharimousavi, Phys. Lett. A 373,325 (2009).
 - [30] T. Tanaka,J.Phys. A:Math.Theor. 39, 219 (2006).
 - [31] D. de Souza, J. Phys. A : Maht. Theor. 39, 203 (2006).
 - [32] O. Von Roos, Phys. Rev. B 27,7547 (1983).
 - [33] O. Von Roos and H. Mavromatis , Phys. Rev. B 31, 2294 (1985).
 - [34] O. Mustafa, S. Habib Mazharimousavi, "Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators", Int. J.Theory.Phys. 46, 1786, (2007).
 - [35] A. Arda and R. Sever," Bound State Solutions of Schrödinger Equation for Generalized Morse Potential with Position-Dependent Mass", Theor. Phy, Vol 56, Issue 1, 51, (2011).
 - [36] K. Bouferrache, " Calcul des Coefficients de Transmission pour une Barrière Trapézoïdale en Potentiel et en Masse pour L'hamiltonien Généralisé à des Masses Dépendant de la position", Mémoire de Magister, Université de Médéa, (2011).
-

Annexes

Propriété des fonctions spéciales utilisées dans nos calculs

Fonction gamma

$$\text{Gamma}[x] = \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

Fonction Airy

Les paires de solutions linéairement indépendantes sont

$$\text{AiryAi}[0] = \text{Ai}(x)$$

$$\text{AiryBi}[0] = \text{Bi}(x)$$

$$\text{AiryAiPrime}[x] = \text{Ai}'(x)$$

$$\text{AiryBiPrime}[x] = \text{Bi}'(x)$$

$$\text{AiryAi}[0] = \frac{1}{3^{2/3} \text{Gamma}[\frac{2}{3}]}$$

$$\text{AiryBi}[0] = \frac{1}{3^{1/6} \text{Gamma}[\frac{2}{3}]}$$

$$\text{AiryAiPrime}[0] = -\frac{1}{3^{1/3} \text{Gamma}[\frac{1}{3}]}$$

$$\text{AiryBiPrime}[0] = \frac{3^{1/6}}{\text{Gamma}[\frac{1}{3}]}$$

$$\chi_1 = -k_2^{2/3} g \quad \chi_2 = -k_2^{2/3} f$$

$$\xi_1 = \frac{k_2^{4/3} g}{ik_1} \quad \xi_2 = \frac{k_2^{4/3} f}{ik_3}$$

$$\mathcal{M}_1 = \frac{\xi_1 \text{Bi}(\chi_1) - \text{Bi}'(\chi_1)}{\text{Ai}'(\chi_1) - \xi_1 \text{Ai}(\chi_1)}$$

$$\mathcal{M}_2 = \frac{e^{ik_1 \frac{d}{2}}}{(\text{Ai}'(\chi_1) + \frac{1}{\mathcal{M}_1} \text{Bi}'(\chi_1))}$$

$$\mathcal{M}_3 = \frac{\mathcal{M}_2}{2} [\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + \frac{1}{\mathcal{M}_1} (\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) e^{-ik_3(\frac{d}{2}-h)}$$

$$\mathcal{M}_4 = \frac{\mathcal{M}_2}{2} [\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)] + \frac{1}{\mathcal{M}_1} (\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) e^{ik_3(\frac{d}{2}-h)}$$

$$\mathcal{M}_5 = \frac{[\mathcal{M}_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} (\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2)) - \mathcal{M}_4 e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} (\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2))] }{[\mathcal{M}_4 e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)} (\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)) - \mathcal{M}_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)} (\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2))]}$$

Annexes

$$\mathcal{M}_6 = \frac{2\mathcal{M}_3 e^{ik_3(-\frac{d}{2}+h)}}{[(\text{Ai}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)) + \frac{1}{\mathcal{M}_5}(\text{Bi}'(\chi_2) + \xi_2 \text{Bi}(\chi_2))]}$$

$$\mathcal{M}_7 = \frac{2\mathcal{M}_3 e^{-ik_3(-\frac{d}{2}+h)}}{[\mathcal{M}_5(\text{Ai}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Ai}(\chi_2)) + (\text{Bi}'(\chi_2) - \xi_2 \text{Bi}(\chi_2))]}$$

ملخص

يعالج موضوع المذكرة الكتلة متعلقة بالموضع PDM وإسهامات مختلف باحثين في هذا المجال و قدمنا حلول دقيقة لمعادلة شرودنجر من اجل هملتوني معمم مع أخذ معاملات مجهولة (α, β, γ) حيث تناولنا اختيار بن دانيال ديك $(\alpha = \gamma = 0 \text{ و } \beta = 1)$ من أجل حاجز كموني ذو شكل مربع. وكتلة تتغير بدلالة الموضع من شكل معين وهذا ما ولد افكار جديدة من حيث عبورا لإلكترونات في المواد و قدمنا الحلول بطريقة حسابية ومحاكاتها وتفسير مختلف النتائج.

Résumé:

Aborde le sujet du mémo lié au placement Les modèles avec des masses dépendant de la position **PDM** et des solutions précises à L'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien généralisée en prenant des paramètres **d'ambiguïté** (α, β, γ) , où nous approchions choisir Ben Daniel, $(\alpha = \gamma = 0 \text{ et } \beta = 1)$

pour une barrière de potentiel rectangulaire et une masse variable trapézoïdale et Calcul analytique des fonctions d'onde et Résultats numériques des fonctions d'onde des coefficients de transmission et l'interprétation différente des résultats.

Abstract:

Approaches to the topic of the placement related memo The models with masses depending on the PDM position and the Schrödinger equations for the generalized Hamiltonian by taking ambiguity parameters (α, β, γ) , where Approach choose Ben Daniel, $(\alpha = \gamma = 0 \text{ and } \beta = 1)$

For a rectangular potential barrier and a trapezoidal variable mass and analytical computation of the wave functions and numerical results of the wave functions of the transmission coefficients and the different interpretation of the results.