

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE : DES SCIENCES

DEPARTEMENT : PHYSIQUE

N° : .....



DOMAINE : SCIENCE DE LA MATIERE

FILIERE : PHYSIQUE

OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par: BARKAT Ismail

Intitulé

**Hamiltonien généralisé de Von Roos avec  
une double barrière de potentiel et en masse**

Soutenu le : 26 /06 /2018 devant le jury composé de:

SABRI Youssef	Université M <sup>ed</sup> BOUDIAF M'sila	Président
BOUFERRACHE Karim	Université M <sup>ed</sup> BOUDIAF M'sila	Rapporteur
DHABABI Mourad	Université M <sup>ed</sup> BOUDIAF M'sila	Examineur
GHOUMID Ali	Université M <sup>ed</sup> BOUDIAF M'sila	Examineur

Année universitaire : 2017/2018

## ***Remerciements***

*Je remercie ALLAH le tout puissant qui m'a offert santé, courage, patience et volonté, me permettant de mener à terme ce présent travail. Je souhaiterais dans un premier temps exprimer mes remerciements les plus profonds envers mon directeur de thèse, le professeur*

*BOUFERRACHE Karim*

*pour ses conseils avisés tant sur le traitement de mon sujet de thèse que sur les « à-côtés », scientifiques et humains.*

*Un grand merci à toute ma famille qui a toujours été présente lorsque j'en ai eu besoin.*

*Enfin, mes sincères remerciements à tous ceux qui ont contribué du près ou du loin à l'accomplissement de ce travail.*

# *Dédicaces*

*À ma chère mère*

*À mon cher père*

*À mes sœurs, mes frères et leurs familles.*

*À mes chers amis.*

*Je dédie ce modeste travail*

## *Table des matières*

<b>Introduction générale</b>	1
<b>Chapitre I: Hamiltonien généralisé</b>	
Introduction	4
I.1. Résolution de l'équation de Schrödinger	6
I.2. Densité de courant et équation de continuité	7
I.3. Revue historique	8
I.3.1. Le choix ( $\alpha = \gamma = \mathbf{0}, \beta = \mathbf{1}$ ) de D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966)	8
I.3.2. Lentement gradués dont les masses effectives dépendent de la position (étudié des semi-conducteurs) de Thaddeus Gora et Ferd Williams (1968)	9
I.3.3. Hamiltonien de Von Roos (1982)	9
I.3.4. Les conditions de continuité de Richard A. Morrow et Kenneth R. Brownstein (1983)	10
I.3.5. Les conditions de continuité de Jean-Marc Lévy-Leblond (1995)	11
I.3.6. La limite de haute énergie ( $\lim_{E \rightarrow \infty} T = \mathbf{1}$ ) de M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura (1998)	11
I.3.7. Le choix ( $\alpha = -\frac{1}{4}, \beta = -\frac{1}{2}$ ) de Mustafa et Mazharimousavi (2007)	12
I.4. Résolution de l'équation de Schrödinger pour Hamiltonien dont la masse dépend de position	12
<b>Chapitre II: Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel et une masse rectangulaires</b>	
II.1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel et une masse constante rectangulaire	16
II.1.1. La barrière du potentiel	16
II.1.2. Cas $E > V_0$	17
II.1.3. Cas $E < V_0$ : effet tunnel	20
II.2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une barrière de potentiel et une masse variable rectangulaires	24
II.2.1. Conditions de continuité	25
II.2.2. Coefficients de transmission	27
<b>Chapitre III: Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double</b>	

## **barrière de potentiel et masse rectangulaires**

III.1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double barrière de potentiel et une masse constante rectangulaire	32
III.1.1 Conditions de continuité	33
III.1.2 Coefficients de transmission	35
III. 2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double barrière de potentiel et une masse variable rectangulaires	38
III.2.1 Conditions de continuité	39
III.2.2 Coefficients de transmission	41

## **Chapitre IV: Résultats numériques et discussions**

IV.1. Les courbes des coefficients de transmission pour une barrière de potentiel et une masse rectangulaires	46
IV.2. Les courbes des coefficients de transmission pour une double barrière de potentiel et une masse rectangulaires	48
IV. 3. L'interprétation physique	49
<b>Conclusion générale</b>	<b>52</b>

### **Référence**

---

## Introduction générale :

Les systèmes mécaniques quantiques avec une masse (efficace) dépendant de la position (PDM) ont attiré beaucoup d'attention et ont inspiré d'intenses activités de recherche au cours des dernières années. Ils sont en effet très utiles dans l'étude de nombreux problèmes physiques, tels que les propriétés électroniques des semi-conducteurs[1] et des points quantiques [2], des noyaux [3], des liquides quantiques [4], la matière condensée[5-6], La recherche de solutions exactes de l'équation de Schrödinger avec un PDM est devenue un sujet de recherche intéressant car telles solutions peuvent fournir une compréhension conceptuelle de certains phénomènes physiques, ainsi qu'un terrain d'essai pour certains schémas d'approximation.

L'équation de Schrödinger avec une masse variable fournit un modèle intéressant d'un point de vue théorique et très utile pour la description de beaucoup de phénomènes physiques. Son utilisation la plus répandue est dans le domaine de la physique des nanostructures des semi-conducteurs. L'intérêt croissant porté à ce domaine est dû au développement impressionnant des technologies sophistiquées de croissance de semi-conducteur, comme l'épitaxie par jet moléculaire. 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 met à l'intérieur du semi-conducteur, et dont la valeur dépend de la nature du matériau étudié. Les solutions exactes des équations de Schrödinger avec une masse effective dépendant de la position et pour certaines formes de potentiels physiques ont beaucoup attiré l'attention ces dernières années [7-8]. Pour un système de masse dépendant de la position, les opérateurs de masse et de l'impulsion ne commutent plus. 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 se pose. Cette question est directement liée aux conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une jonction abrupte. Von Roos [9] a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H_{VR} = \frac{1}{4} [m^\alpha(\hat{x})\hat{p}m^\beta(\hat{x})\hat{p}m^\gamma(\hat{x}) + m^\gamma(\hat{x})\hat{p}m^\beta(\hat{x})\hat{p}m^\alpha(\hat{x})] + V(\hat{x}) \quad (1)$$

Ou  $\alpha, \beta, \gamma$  sont des paramètres, vérifiant  $\alpha + \beta + \gamma = -1$ , souvent appelés paramètres d'ambiguïté. D'où l'hamiltonien de Von Roos est hermétique.

Le mémoire est structuré en 4 chapitres en plus d'une introduction et de la conclusion.

Dans le premier chapitre, nous passons en revue des différents travaux remarquables qui ont porté ces dernières années sur des systèmes quantiques à masses dépendant de la position.

Nous y mettrons en lumière leurs principales conclusions quant à la compréhension des nouveaux phénomènes physiques liés à la variabilité spatiale de la masse effective.

Dans le chapitre 2 et 3 nous allons aborder la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée indépendante du temps pour un modèle intéressant en utilisant l'approche de la fonction propre et les résultats analytiques et numériques de fonction d'onde et des coefficients de transmission des résultats obtenus par Levy-Leblond pour :une barrière potentielle et (double potentiel)rectangulaire et une masse variable rectangulaire

Le quatrième chapitre est consacré à l'illustration et la discussion de nos résultats. Nous y présentons des courbes de coefficients de transmission en fonction de l'énergie pour toutes les configurations de potentiels et de masses étudiées dans le chapitre précédent , et ainsi proposer l'interprétation physique dans deux cas :mécanique classique et mécanique quantique.

***Chapitre I:***  
***Hamiltonien généralisé***

**Introduction :**

La naissance de la physique quantique s'est produite le 14 décembre 1900, lorsque Planck, devant la Société Allemande de physique, proposa une formule simple en parfaite accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Planck avait d'abord obtenu son résultat à partir d'arguments empiriques, mais s'était aperçu qu'on pouvait déduire le point central de son argumentation à partir de la thermodynamique statistique en faisant l'hypothèse curieuse que des oscillateurs mécaniques chargés, de fréquence  $\nu$ , ne pouvaient émettre ou absorber de l'énergie lumineuse que par des quantités discrètes ( des « quanta » d'énergie  $nh\nu$  ).

Planck comprit que le **quantum d'action**  $h$ , est une constante fondamentale :

$$h = 6,6261 \times 10^{-34} \text{js}$$

Les quanta de Planck étaient mystérieux, mais son résultat étonnamment été efficace jusqu'à 1905, en plus la communauté scientifique et Planck lui-même n'apprécièrent pas la portée de sa découverte. A cette date, Einstein publie son célèbre mémoire sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière [1], suivi d'une série d'articles fondamentaux où il a révélé et rectifié certaines incohérences dans les raisonnements de Planck.

Si l'on pousse les idées de celui-ci, il faut admettre que la lumière elle-même a des propriétés quantiques, et Einstein introduit le concept de quantum de rayonnement, appelé photon par Lewis en 1926, particule qui, pour une lumière de fréquence  $\nu$  ou de pulsation  $\omega$ , a une énergie :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{I.1})$$

Au passage, Einstein comprend l'explication et les lois de l'effet photoélectrique découvert en 1887 par Hertz, et étudié systématiquement par Lenard entre 1899 et 1902, puis par Millikan. Le photon est également pourvu d'une impulsion :

$$P = \hbar k \quad (\text{I.2})$$

Où  $k$  est le vecteur d'onde de l'onde électromagnétique, comme le prouveront en 1923 les expériences de Compton (diffusion des rayons X par les électrons libres d'une mince feuille d'aluminium).

Même si les quanta de Planck étaient mystérieux, ils étaient bien acceptés par la communauté scientifique, étant donné la qualité de son résultat. Au contraire, les quanta d'Einstein soulevèrent de sérieuses controverses qui persistèrent plusieurs années. Plusieurs physiciens considéraient l'idée comme absurde car en contradiction flagrante avec les

équations de Maxwell qui décrivent l'énergie et l'impulsion du rayonnement comme des fonctions continues tant dans l'espace que dans le temps. Einstein en était bien conscient, mais il pensait que les mesures en optique ne concernaient que des moyennes dans le temps, et qu'il était concevable que les équations de Maxwell fussent insuffisantes dès lors que l'on avait affaire à des processus quasi-instantanés. Einstein qualifiait son hypothèse corpusculaire de « pas en avant révolutionnaire ».

Il avait compris la « dualité » de la manifestation des propriétés de la lumière qui peuvent être à la fois ondulatoires et corpusculaires. C'est la découverte primordiale, le véritable point de départ de la théorie quantique.

La seconde étape se situe pendant les années 1912–1914. Niels Bohr, en cherchant un modèle cohérent de la structure des atomes, effectue la synthèse entre le principe de combinaison des raies spectrales de Ritz, le modèle atomique de Rutherford (qui venait, en 1911, de découvrir l'existence du noyau), et les quanta de Planck et Einstein. Bohr postule que les énergies des édifices atomiques et moléculaires n'adoptent que des valeurs discrètes, et que l'émission ou l'absorption de lumière par ces édifices ne se fait que pour certaines fréquences lumineuses bien précises :

$$v_{if} = |E_i - E_f|/h \quad (I.3)$$

Où  $E_i$  et  $E_f$  sont les énergies du système avant et après l'émission (ou l'absorption). Ayant eu fortuitement connaissance de la formule empirique de Balmer, Bohr devine une règle de quantification des énergies et développe en quelques semaines son célèbre modèle de l'atome d'hydrogène. Le mécanisme de l'émission et de l'absorption de la lumière restait obscur dans la théorie de Bohr. Il ne fut expliqué que plus tard, en particulier par Einstein. Cependant, dès 1914, les expériences de Franck et Hertz montraient directement la quantification des énergies dans les atomes.

Ainsi, l'histoire avait voulu que la quantification du rayonnement fût découverte avant celle de la matière. Cette dernière, cependant, semblait impliquer un caractère « discontinu » des lois de la nature qui heurtait la sensibilité de certains physiciens, et c'est avec enthousiasme qu'Einstein, entre autres, accueillit en 1923 la remarquable hypothèse ondulatoire de Louis-Broglie. De même que la lumière présente un comportement corpusculaire, de même, suppose Louis de Broglie, les particules, par exemple l'électron, peuvent présenter un comportement ondulatoire. à toute particule de vitesse et d'impulsion, de Broglie « associe » une onde, de longueur d'onde :

$$\lambda = h/p \quad (I.4)$$

Cette hypothèse ondulatoire permettait d’entrevoir la quantification de la matière comme un phénomène des ondes stationnaires, et restaurait la continuité étant désirée par Einstein.

Louis de Broglie s’était inspiré d’une série de travaux théoriques, notamment de Marcel Brillouin. Par ailleurs, il fréquentait le laboratoire de son frère Maurice de Broglie, et il s’étonnait d’entendre les physiciens parler du même être physique tantôt en tant qu’«électron», tantôt en tant que « rayon  $\beta$  » dans la radioactivité.

La théorie de la mécanique quantique dans son formalisme actuel s’est faite très rapidement entre 1925 et 1927, et apparait comme le fruit de la conjonction exceptionnelle des talents de physiciens et de mathématiciens comme Schrödinger, Heisenberg, Born, Bohr, Dirac, Pauli, Hilbert, Von Neumann

**I.1.Résolution de l'équation de Schrödinger:**

Nous avons vu précédemment que l'opérateur hamiltonien est la somme des opérateurs d'énergie cinétique et du potentiel c'est-a –dire :

$$H(t) = T + V(t) \tag{I.5}$$

H dépende donc du temps si les potentiels qui entrent en jeu dépendent du temps. lorsque l'opérateur H ne dépende pas du temps, ceci facilite la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode de séparation des variable spatiale et temporelle.

Si l'on considère donc une particule évoluant dans un potentiel indépendant du temps les états d'énergie dits (stationnaire) et la densité de probabilité de présence  $\|\psi(r)\|^2$  est indépendant du temps. On a donc :

$$\|\psi(r, t)\|^2 = \|\psi(r)\|^2 \tag{I.6}$$

Dans ce cas,  $\psi(r, t)$  prend la forme :

$$\psi(r, t) = \phi(r)x(t) \tag{I.7}$$

$\psi(r, t)$  désigne la fonction d'onde décrivant un état stationnaire d'énergie E ou  $\phi(r)$  fonction d'espace et  $x(t)$  fonction dépendante du temps. En remplaçant l'expression de  $\psi(r, t)$  dans l'équation Schrodinger on obtient :

$$i\hbar\varphi \frac{dx}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m} x\Delta\varphi + V\varphi x \tag{I.8}$$

Donc :

$$\frac{i\hbar}{x} \frac{dx}{dt} = \frac{(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+v)\varphi}{\varphi} \tag{I.9}$$

$$i\hbar \frac{dx}{x} = E dt \tag{I.10}$$

La solution de cette équation est :

$$x(t) = x(0)e^{-i\alpha(t)} \tag{I.11}$$

Et pour la fonction  $\varphi(r)$  on a :

$$H\varphi(r) = E\varphi(r) \tag{I.12}$$

Donc on a :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + v\right)\varphi(r) = E\varphi(r) \tag{I.13}$$

Ou :

- ❖  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ js}$ .
- ❖  $\Delta$  est l'opérateur de laplacien.
- ❖  $m$  est la masse de la particule.
- ❖  $V(r)$  l'énergie potentiel de la particule au point  $r$ .

C'est l'équation de Schrödinger des états stationnaires, les valeurs de  $E$  peuvent former un ensemble discret notée  $E_n$  ou continu, appelé spectre de l'énergie. L'états stationnaire correspondant à la plus petite valeur de  $E$  du spectre est appelé l'états fondamentale du system. Donc la solution  $\psi(r, t)$  prend la forme :

$$\psi(r, t) = \varphi(r)e^{-i\alpha(t)} \tag{I.14}$$

Donc :

$$i\hbar \frac{d\psi(r,t)}{dt} = -\hbar\alpha\psi(r, t) = H\psi(r, t) \tag{I.15}$$

Finalement on a :

$$\psi(r, t) = \varphi(r)e^{\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)} \tag{I.16}$$

**I.2.Densité de courant et équation de continuité :**

Considérons une particule dont les états sont décrit par  $|\psi(t)\rangle$

D'après la relation :

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \tag{I.17}$$

Ou :

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t) \tag{I.18}$$

On a :

$$\int \rho(\vec{r}, t)d^3r = 1 \tag{I.19}$$

$\rho(\vec{r}, t)$  est la densité de probabilité et la probabilité  $dP(\vec{r}, t)$  de trouver la particule à l'instante  $t$  dans le volume élémentaire  $d^3r$  situé au point  $\vec{r}$  est :

$$dP(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t)d^3r \tag{I.20}$$

Soit une particule de masse  $m$  dans un potentiel  $V$ , l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left\{ \begin{aligned} \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) &= i \hbar \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} & (I.21) \\ \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi^*(\vec{r}, t) &= -i \hbar \frac{d\psi^*(\vec{r}, t)}{dt} & (I.22) \end{aligned} \right.$$

On a :

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\psi\psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \quad (I.23)$$

Utilisant l'identité :

$$(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = \text{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (I.24)$$

On obtient l'équation :

$$\frac{d}{dt} \|\psi\|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \text{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0 \quad (I.25)$$

Cette équation dite équation de continuité elle décrit la conservation d'une grandeur physique on prend par exemple la conservation d'une charge électrique dans ce cas l'équation précédente devient :

$$\text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (I.26)$$

La quantité  $\rho(\vec{r}, t)$  est la densité volumique de la charge :

$$\rho(\vec{r}, t) = \|\psi\|^2 \quad (I.27)$$

La quantité  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  est le courant ou bien courant de probabilité tel que :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\vec{r}, t) \Delta \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \Delta \psi^*(\vec{r}, t)) \quad (I.28)$$

Et on a :

$$\psi(r, t) = \varphi(r) e^{\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)} \quad (I.29)$$

On obtient :

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*) \quad (I.30)$$

### I.3. Revue historique :

#### I.3.1. Le choix ( $\alpha = \gamma = 0, \beta = 1$ ) de D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966) :

Dans cet article [10], 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 constante d'un électron varient à travers la jonction. En conclusion, ces auteurs préconisent la forme adéquate suivante de l'hamiltonien :

$$H_{BDD} = \frac{1}{2} \left[ P \frac{1}{m(x)} P \right] \quad (I.30)$$

Où :

$$P = -i \hbar \frac{d}{dx} \quad (I.31)$$

le choix de Ben Daniel ( $\alpha = \gamma = 0$  et  $\beta = 1$ )

### **I.3.2. Lentement gradués dont les masses effectives dépendent de la position (étudié des semi-conducteurs) de Thaddeus Gora et Ferd Williams (1968) :**

Dans cet article [11], **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 :

$$H_{GW(B)} = \frac{1}{4} \left[ P^2 \frac{1}{m(x)} + \frac{1}{m(x)} P^2 \right] \quad (I.32)$$

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.3.3. Hamiltonien de Von Roos (1982):**

Dans cet article [9] 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 hamiltonien 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 [9], 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 semi-conducteurs. Mais dans un autre article [12], Von Roos considère un semi-conducteur 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.3.4. Les conditions de continuités de Richard A. Morrow et Kenneth R. Brownstein (1983) :**

Morrow [13] a considéré une classe de hamiltoniens hermitique de masse effective dont l'énergie cinétique est de la forme :

$$\frac{1}{4} [m(x)^\alpha P m(x)^\beta P m(x)^\gamma + m(x)^\gamma P m(x)^\beta P m(x)^\alpha] \quad (\text{I.33})$$

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  $\psi$  et sa dérivée spatiale  $\psi'$ . 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 [14] Morrow suggère pour une hétérojonction abrupte entre deux semi-conducteurs non uniforme à une dimension d'utiliser l'hamiltonien à masse effective :

**I.3.5. Les conditions de continuités de Jean-Marc Lévy-Leblond (1995):**

Jean-Marc Lévy-Leblond [15], 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, ce la conduit aux conditions de continuités de la fonction d'onde  $\psi$  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 [16], 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.3.6. La limite de haute énergie ( $\lim_{E \rightarrow \infty} T = 1$ ) de M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura (1998) :**

Dans leur article [17] sous le titre " Une remarque sur la limite de haute énergie du problème de la diffusion avec la masse dépendant de la position", ces deux auteurs sont arrivés à la conclusion que le coefficient de transmission du problème de diffusion définie par l'équation Schrödinger :

$$\left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + E - V(x) \right\} \psi(x) = 0 \tag{I.34}$$

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 hétéro structures et les techniques de jet moléculaire permettent actuellement, de réaliser des interfaces abruptes à différents matériaux.

**I.3.7. Le choix ( $\alpha = -\frac{1}{4}, \beta = -\frac{1}{2}$ ) de Mustafa et Mazharimousavi (2007) :**

Ces auteurs [12] 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 dépendent 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 [7-8].

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 a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H = -\frac{1}{4} [m^\alpha \hat{P} m^\beta \hat{P} m^\gamma + m^\gamma \hat{P} m^\beta \hat{P} m^\alpha] + V \tag{I.35}$$

**I.4. Résolution de l'équation de Schrödinger pour Hamiltonien dont la masse dépend de position :**

D'après Von Ross :

$$H_{VR} = \frac{1}{4} (m^\alpha(\hat{x}) \hat{p} m^\beta(\hat{x}) \hat{p} m^\gamma(\hat{x}) + m^\gamma(\hat{x}) \hat{p} m^\beta(\hat{x}) \hat{p} m^\alpha(\hat{x}) + V(\hat{x})) \tag{I.36}$$

$\alpha, \beta,$  et  $\gamma$  sont des réels, qui doivent évidemment satisfaire la contrainte suivante :

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \tag{I.37}$$

On a l'équation de Schrödinger :

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{I.38}$$

L'opérateur impulsion est donné par :

$$\hat{p}(x) = -i\hbar\partial_x \tag{I.39}$$

L'hamiltonien effective généralisé est donné par :

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha(\hat{x}) \hat{p} m^\beta(\hat{x}) \hat{p} m^\gamma(\hat{x}) + m^\gamma(\hat{x}) \hat{p} m^\beta(\hat{x}) \hat{p} m^\alpha(\hat{x}) + V(\hat{x})) \tag{I.40}$$

On remplace  $\hat{P}$  et  $H$  dans (I.38) il vient :

$$\left\{ -\frac{1}{4} \left[ m(x)^\alpha \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\gamma + m(x)^\gamma \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\alpha \right] + V(x) - E \right\} \psi(x) = 0 \quad (\text{I.41})$$

On dérive l'équation suivantes :

$$m(x)^\alpha \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\gamma \psi(x) = m(x)^\alpha \frac{d}{dx} \left\{ \gamma m(x)' m(x)^{\gamma+\beta-1} + m(x)^{\beta+\gamma} \frac{d}{dx} \right\} \psi(x) \quad (\text{I.42})$$

$$m(x)^\gamma \frac{d}{dx} m(x)^\beta \frac{d}{dx} m(x)^\alpha \psi(x) = m(x)^\gamma \frac{d}{dx} \left\{ \alpha m(x)' m(x)^{\alpha+\beta-1} + m(x)^{\beta+\alpha} \frac{d}{dx} \right\} \psi(x) \quad (\text{I.43})$$

Les dérivées secondes :

$$\begin{aligned} m(x)^\alpha \frac{d}{dx} \left[ \gamma m(x)' m(x)^{\gamma+\beta-1} + m(x)^{\beta+\gamma} \frac{d}{dx} \right] = \\ \left[ \gamma m''(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} + \gamma (\gamma + \beta - 1) m'(x)^2 m(x)^{\gamma+\beta-2} + \gamma m'(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} \frac{d}{dx} + \right. \\ \left. (\gamma + \beta) m'(x) m(x)^{\gamma+\beta-1} \frac{d}{dx} + m(x)^{\gamma+\beta} \frac{d^2}{dx^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{I.44})$$

et

$$\begin{aligned} m(x)^\gamma \frac{d}{dx} \left[ \alpha m(x)' m(x)^{\alpha+\beta-1} + m(x)^{\beta+\alpha} \frac{d}{dx} \right] = \\ \left[ \alpha m''(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} + \alpha (\alpha + \beta - 1) m'(x)^2 m(x)^{\alpha+\beta-2} + \alpha m'(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} \frac{d}{dx} + \right. \\ \left. + (\alpha + \beta) m'(x) m(x)^{\alpha+\beta-1} \frac{d}{dx} + m(x)^{\alpha+\beta} \frac{d^2}{dx^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{I.45})$$

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.44) et (I.45) on trouve :

$$\begin{aligned} H = \frac{\hbar^2}{4} \left[ \gamma \frac{m''(x)}{m^2(x)} + \gamma (\gamma + \beta - 1) \frac{m'(x)^2}{m^3(x)} + \gamma \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} + \right. \\ \left. (\gamma + \beta) \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} - \frac{1}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha \frac{m''(x)}{m^2(x)} + \alpha (\alpha + \beta - 1) \frac{m'(x)^2}{m^3(x)} + \alpha \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} + (\alpha + \right. \\ \left. \beta) \frac{m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} - \frac{1}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} \right] + V(x) \end{aligned} \quad (\text{I.46})$$

Après la simplification l'hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = \left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} \right\} + \tilde{V}(x) \quad (\text{I.47})$$

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

$$\tilde{V}(x) = V(x) - [(1 + \beta)m'(x)m''(x) - 2(\beta + 1) + \alpha(\beta + \alpha + 1)] \frac{1}{4m^3(x)} \quad (\text{I.48})$$

L'équation de Schrödinger s'écrira donc :

$$\left\{ -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} + \tilde{V}(x) - E \right\} \psi(x) = 0 \quad (\text{I.49})$$

## *Chapitre II:*

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

## II.1. Résolution de l'équation Schrödinger pour un potentiel et masse (constant) rectangulaire :

### II.1.1. La barrière de potentiel :

On considère maintenant le cas d'une barrière rectangulaire de largeur  $a$  et de hauteur  $V_0$ , comme indiqué sur la figure (II.1). Nous allons étudier la propagation d'une onde incidente venant de la droite dans les deux cas où l'énergie  $E$  est supérieure ou inférieure à  $V_0$ . Ces deux cas permettent d'illustrer deux phénomènes ondulatoires importants : la résonance et l'effet tunnel

La barrière de potentiel est définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } (x < 0) \text{ région I} & \text{(II. 1)} \\ V_0 & \text{pour } (a > x > 0) \text{ région II} & \text{(II. 2)} \\ 0 & \text{pour } (x > a) \text{ région III} & \text{(II. 3)} \end{cases}$$

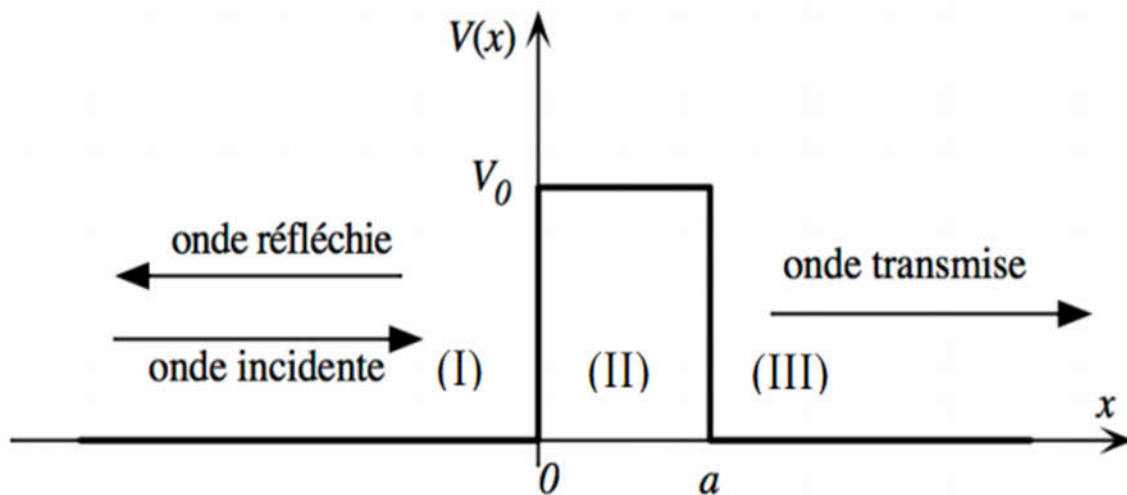


Figure (II.1) : La barrière de potentiel unidimensionnel

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

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{(II. 4)}$$

Dans la région (I) et (III), l'énergie potentiel est nulle :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{(II. 5)}$$

Dans la région (II), l'énergie potentiel est égale  $V_0$ :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \quad (\text{II. 6})$$

Pour  $E > V_0$  :

On obtient les équations indépendantes de temps :

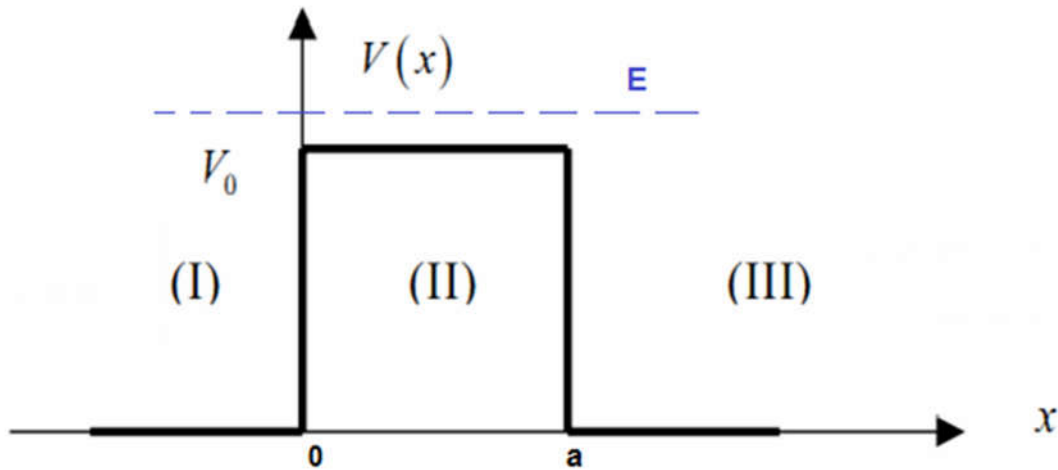
$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I(x) = 0 & (\text{II. 7}) \\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_{II}(x) = 0 & (\text{II. 8}) \\ \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{III}(x) = 0 & (\text{II. 9}) \end{cases}$$

Soit encore, compte tenu des définitions:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0 & (\text{II. 10}) \\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0 & (\text{II. 11}) \\ \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_{III}(x) = 0 & (\text{II. 12}) \end{cases}$$

Avec  $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

**II.1.2.Cas  $E > V_0$ :**



**Figure (II.2):** La barrière de potentiel ( $E > V_0$ )

Dans ce cas, on a toujours en mécanique classique une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région central. Et dans mécanique quantiques on trouve dans les trois régions

( $x < 0$ ), ( $a > x > 0$ ) et ( $x > 0$ )

La solution générique dans les régions s'écrit :

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + \hat{A}_1 e^{-ik_1 x} & \text{(II. 13)} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + \hat{A}_2 e^{-ik_2 x} & \text{(II. 14)} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + \hat{A}_3 e^{-ik_1 x} & \text{(II. 15)} \end{cases}$$

Prenons  $\hat{A}_3 = 0$  (Particule incidente venant de  $x = -\infty$ ) donc  $\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x}$

Tel que  $A_1, \hat{A}_1$  : sont des constantes d'intégration

$A_1 e^{ik_1 x}$  et  $\hat{A}_1 e^{-ik_1 x}$  les fonctions d'onde transmission et réflexion

**Conditions de continuité :**

**Raccord des régions I et II :**

Les conditions de continuité en  $x = 0$

La continuité de la fonction :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + \hat{A}_1 = A_2 + \hat{A}_2 \quad \text{(II. 16)}$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\begin{cases} \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) & \text{(II. 17)} \\ K_1(A_1 - \hat{A}_1) = K_2(A_2 - \hat{A}_2) & \text{(II. 18)} \end{cases}$$

Les conditions de continuité conduisent au système :

$$\begin{cases} (A_1 + \hat{A}_1) = (A_2 + \hat{A}_2) & \text{(II. 19)} \\ (A_1 - \hat{A}_1) = \frac{K_2}{K_1} (A_2 - \hat{A}_2) & \text{(II. 20)} \end{cases}$$

Avec l'addition de (II. 19) et (II. 20) nous avons l'équation (II. 21) et nous avons l'équation (II. 22) de la soustraction de (II. 19) de (II. 20) :

$$A_1 = \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) A_2 + \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \hat{A}_2 \quad \text{(II. 21)}$$

$$\hat{A}_1 = \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) A_2 + \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) \hat{A}_2 \quad \text{(II. 22)}$$

**Raccord des régions II et III :**

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} + \hat{A}_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}$$

Continuité de la dérivée en  $x = a$  :

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a} = \frac{k_1}{k_2} (A_3 e^{ik_1 a})$$

Alors :

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} & \text{(II. 23)} \\ A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a} = \frac{k_1}{k_2} (A_3 e^{ik_1 a}) & \text{(II. 24)} \end{cases}$$

En addition (II. 23) à (II. 24) nous avons eu la relation (II. 25) et nous avons eu l'équation (II. 26) de la soustraction de (II. 23) de (II. 24)

$$\begin{cases} A_2 = \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 & \text{(II. 25)} \\ A'_2 = \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 & \text{(II. 26)} \end{cases}$$

**Coefficient de transmission:**

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 :

$$J(x) = -i \frac{\hbar}{2m} \left\{ \psi(x)^* \frac{d}{dx} \psi(x) - \psi(x) \frac{d}{dx} \psi(x)^* \right\} \quad \text{(II. 27)}$$

Remarquons que l'expression du flux (du courant) en un point se calcule sans qu'il soit nécessaire de connaître la fonction d'onde partout. Par contre, pour affirmer que l'impulsion est bien définie, il faut connaître la fonction d'onde partout. Toute référence à une particule qui aurait une impulsion précise dans telle région limitée de l'espace est dénuée de sens en mécanique ondulatoire car la particule qui a une impulsion précise,  $p$ , occupe tout l'espace : sa fonction d'onde est  $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ . Par contre tout état présente un courant bien défini en chaque point.

Courant incident :

$$j_i = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 \Rightarrow j_i = \hbar v_1 |A_1|^2 \quad \text{(II. 28)}$$

Courant réflexion :

$$j_r = \frac{\hbar k_2}{m} |A'_1|^2 \Rightarrow j_r = \hbar v_2 |A'_1|^2 \quad (\text{II. 29})$$

Courant transmis :

$$j_t = \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2 \Rightarrow j_t = \hbar v_1 |A_3|^2 \quad (\text{II. 30})$$

Le coefficient de transmission :

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (\text{II. 31})$$

Le coefficient de réflexion :

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = \frac{|A'_1|^2}{|A_1|^2} \quad (\text{II. 32})$$

Les coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement donnés

$j_i = j_r + j_t \Rightarrow T + R = 1$  , d'après le principe de conservation de densité du courant de probabilité

En remplaçant (II. 25) et (II. 26) dans (II. 21) et (II. 22) on trouve :

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{+ik_2 a}} A_1 \quad (\text{II. 33})$$

$$\text{Avec : } \sin(k_2 a) = \frac{e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}}{2} \quad (\text{II. 34})$$

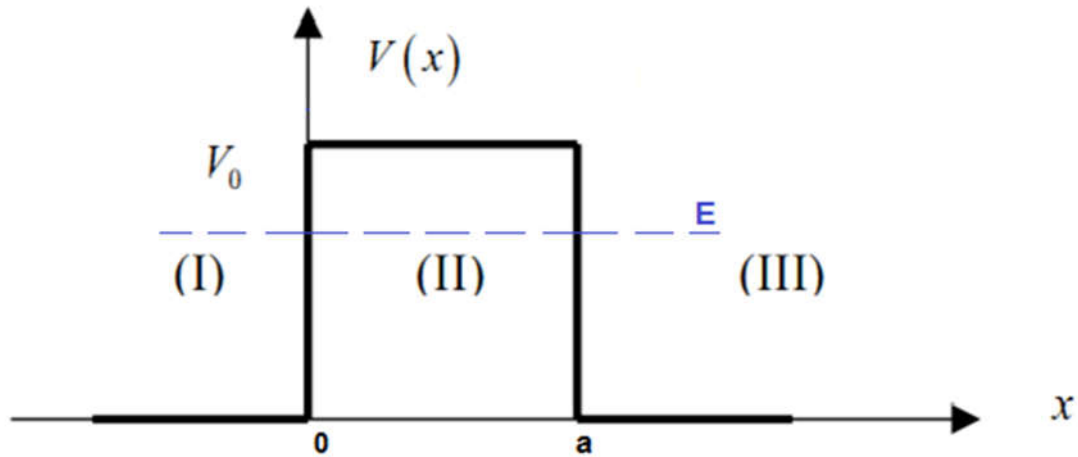
On remplace  $k_1$  et  $k_2$  par leur valeur il vient :

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + \sin^2 \left[ \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} a \right]} \quad (\text{II. 35})$$

On pose  $\frac{E}{V_0} = x$  :

$$T = \frac{4(x^2 - x)}{\sin^2 \left[ \sqrt{2(x-1)\pi} \right] + 4(x^2 - x)} \quad (\text{II. 36})$$

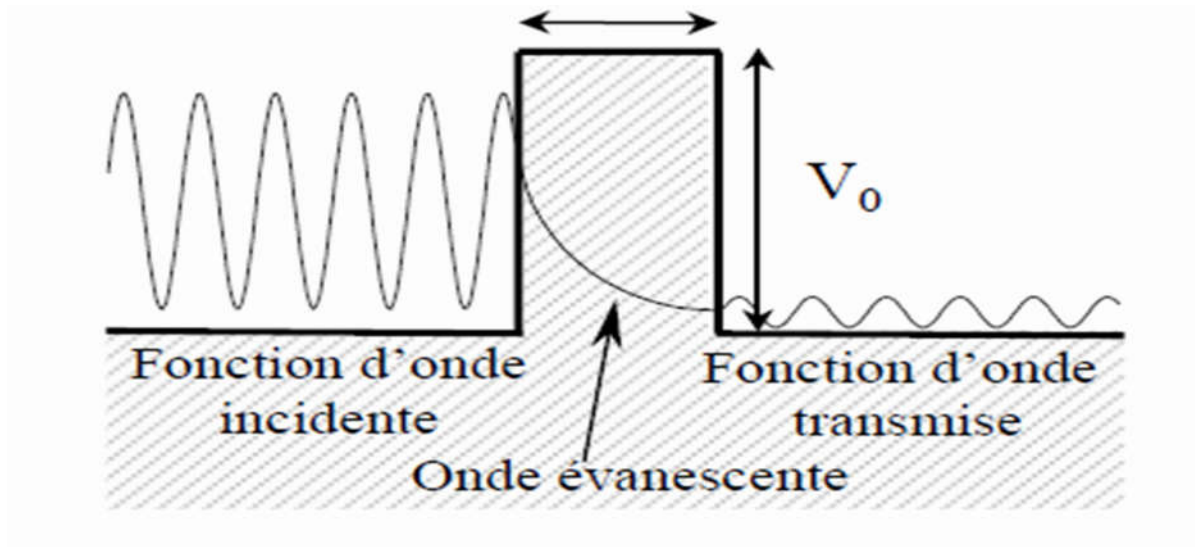
**II.1.3. Cas  $E < V_0$ : effet tunnel :**



**Figure (II.3):** La barrière de potentiel ( $E < V_0$ )

L'effet tunnel est l'une des conséquences les plus spectaculaires de la mécanique ondulatoire introduite dans les années 1923-1927 essentiellement par Louis de Broglie et Erwin Schrödinger l'origine de cet effet provient de ce qu'on a appelé la dualité onde corpuscule [11]. A toute onde on peut associer des particules: par exemple, la lumière peut se décrire comme des ondes électromagnétiques ou se comporter comme un flux de photons, et inversement toute particule matérielle peut avoir des comportements relevant plutôt du domaine des ondes.

En mécanique classique, une particule rencontrant une barrière de potentiel, ne peut la traverser s'il possède une énergie  $E$  inférieure à celle de barrière, dans une approche quantique, la fonction d'onde  $\psi$  associée à la particule n'est pas nulle à l'intérieur et au bord de la barrière potentiel (**Figure II.3**). Dans ces conditions, les particules ont la possibilité de franchir la barrière potentielle lorsque la largeur de celle-ci n'est pas trop grande. Ce phénomène purement quantique, porte le nom (effet tunnel).



**Figure (II.4):** La barrière de potentiel ( effet tunnel)

La solution générique dans les régions s'écrit :

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (\text{II. 37})$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{k_2 x} + A_2' e^{-k_2 x} \quad (\text{II. 38})$$

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \quad (\text{II. 39})$$

Avec  $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

**Conditions de continuité :**

**Raccord des régions I et II :**

Les conditions de continuité en  $x=0$

La continuité de la fonction :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A_1' = A_2 + A_2' \quad (\text{II. 40})$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \quad (\text{II. 41})$$

$$ik_1(A_1 - A_1') = k_2(A_2 - A_2') \quad (\text{II. 42})$$

**Raccord des régions II et III :**

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{k_2 a} + \hat{A}_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}$$

Continuité de la dérivée en  $x=a$ :

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \Rightarrow k_2(A_2 e^{k_2 a} - \hat{A}_2 e^{-k_2 a}) = ik_1(A_3 e^{ik_1 a})$$

Donc on a :

$$\begin{cases} (A_1 + A'_1) = (A_2 + A'_2) & \text{(II. 43)} \\ iK_1(A_1 - A'_1) = K_2(A_2 - A'_2) & \text{(II. 44)} \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} A_2 e^{k_2 a} + \hat{A}_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} & \text{(II. 45)} \\ k_2(A_2 e^{k_2 a} - \hat{A}_2 e^{-k_2 a}) = ik_1(A_3 e^{ik_1 a}) & \text{(II. 46)} \end{cases}$$

De cela on déduit :

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + ik_2)^2 e^{k_2 a} - (k_1 - ik_2)^2 e^{-k_2 a}} A_1 \quad \text{(II. 47)}$$

Dans le cas ou  $k_2 a \gg 1$ , qui nous intéressera, on a simplement :

$$T = \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} e^{-2k_2 a} \quad \text{(II. 48)}$$

On remplace  $k_1$  et  $k_2$  par leur valeur il vient :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\pi\sqrt{2(1 - \frac{E}{V_0})}} \quad \text{(II. 49)}$$

On pose  $\frac{E}{V_0} = x$  :

$$T = 16(x - x^2)e^{-2\pi\sqrt{2(1-x)}} \quad \text{(II. 50)}$$

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

On va considérer maintenant le problème de la transmission d'une particule à travers une barrière de potentiel rectangulaire et en masse :

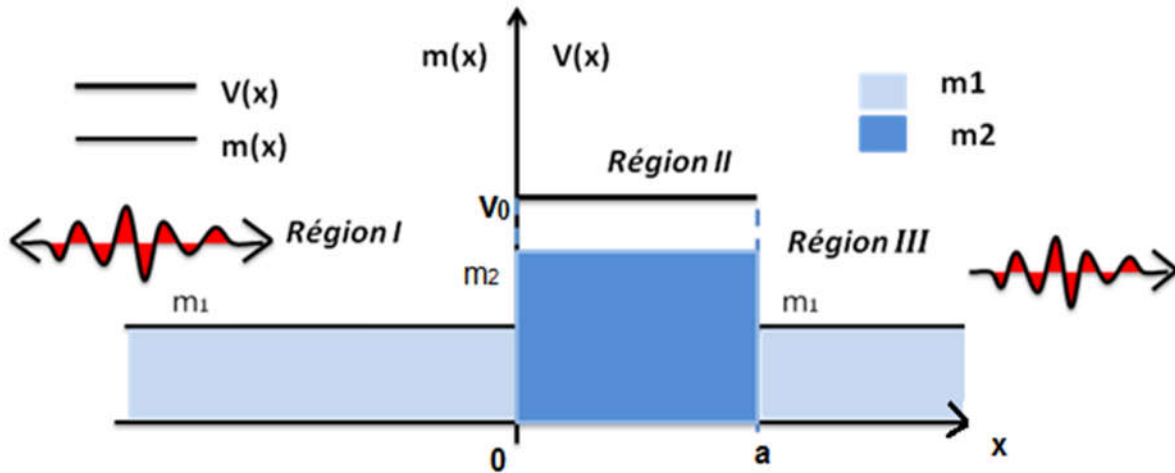


Figure (II.5)

$V(x)$  barrière du potentiel et une  $m(x)$  masse rectangulaires est définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } (x < 0) \text{ région I} \\ V_0 & \text{pour } (a > x > 0) \text{ région II} \\ 0 & \text{pour } (x > a) \text{ région III} \end{cases} \quad (\text{II. 51})$$

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{pour } (x < 0) \text{ région I} \\ m_2 & \text{pour } (a > x > 0) \text{ région II} \\ m_1 & \text{pour } (x > a) \text{ région III} \end{cases} \quad (\text{II. 52})$$

On a :

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II. 53})$$

et

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha(\hat{x})\hat{p}m^\beta(\hat{x})\hat{p}m^\gamma(\hat{x}) + m^\gamma(\hat{x})\hat{p}m^\beta(\hat{x})\hat{p}m^\alpha(\hat{x}) + V(\hat{x})) \quad (\text{II. 54})$$

Donc l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} + (V(x) - \varepsilon)\psi(x) \\
 & + [(1 + \beta)m(x)m'(x)'' - 2(\beta + 1 + \alpha(\alpha + \beta + 1))m'(x)^2] \frac{\psi(x)}{4m^3(x)} \\
 & = 0
 \end{aligned} \tag{II.55}$$

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  $x=1$  et puis raccorder les solutions en  $x=0$  et  $x=a$  en utilisant des conditions de continuité.

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

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{II.56}$$

pour  $E > V_0$  :

Equation aux valeurs propres dans la région est :

$$\begin{cases}
 \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2} \psi_I(x) = 0 \\
 \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2} (E - V) \psi_{II}(x) = 0 \\
 \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2} \psi_{III}(x) = 0
 \end{cases} \tag{II.57}$$

Avec  $k_1^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2}$

La solution générique dans la région I s'écrit :

$$\begin{cases}
 \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + \hat{A}_1 e^{-ik_1x} \\
 \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x} + \hat{A}_2 e^{-ik_2x} \\
 \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x} + \hat{A}_3 e^{-ik_1x}
 \end{cases} \tag{II.58}$$

Prenons  $\hat{A}_3 = 0$  (Particule incidente venant de  $x = -\infty$ ) donc  $\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x}$

Tel que  $A_1, \hat{A}_1$  : sont des constantes d'intégration

$A_1 e^{ik_1x}$  et  $\hat{A}_1 e^{-ik_1x}$  les fonctions d'onde de transmission et de réflexion

### II.2.1 Conditions de continuité :

Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée

$\psi$  est continue et  $\frac{\psi'}{m}$  continue, choix de Lévy – Leblond

### Raccord des régions I et II :

Les conditions de continuité en  $x=0$

La continuité de la fonction :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$$

La continuité de la dérivée de la fonction sur la masse :

$$\begin{cases} \frac{1}{m_1} \psi'_I(0) = \frac{1}{m_2} \psi'_{II}(0) \\ \frac{k_1}{m_1} (A_1 - A'_1) = \frac{k_2}{m_2} (A_2 - A'_2) \end{cases} \quad (\text{II. 59})$$

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

Les conditions de continuité conduisent au système :

$$\begin{cases} (A_1 + A'_1) = (A_2 + A'_2) & (\text{II. 60}) \\ (A_1 - A'_1) = \frac{v_2}{v_1} (A_2 - A'_2) & (\text{II. 61}) \end{cases}$$

Avec l'addition de (II. 60) et (II. 61) nous avons l'équation (II. 62) et nous avons l'équation (II. 63) de la soustraction de (II. 60) de (II. 61) :

$$A_1 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2k_1} \right) A_2 + \left( \frac{v_1 - v_2}{2k_1} \right) A'_2 \quad (\text{II. 62})$$

$$A'_1 = \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) A_2 + \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) A'_2 \quad (\text{II. 63})$$

### Raccord des régions II et III :

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

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

$$\frac{1}{m_1} \psi'_I(a) = \frac{1}{m_2} \psi'_{II}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a} = \frac{v_1}{v_2} A_3 e^{ik_1 a}$$

Alors :

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2 a} + A_2' e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_2 a} & \text{(II. 64)} \\ A_2 e^{ik_2 a} - A_2' e^{-ik_2 a} = \frac{v_1}{v_2} A_3 e^{ik_1 a} & \text{(II. 65)} \end{cases}$$

Avec l'addition de (II. 64) et (II. 65) nous avons l'équation (II. 66) et nous avons l'équation (II. 67) de la soustraction de (II. 64) de (II. 65) :

$$\begin{cases} A_2 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 & \text{(II. 66)} \\ A_2' = \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 & \text{(II. 67)} \end{cases}$$

En remplaçant (II. 7) et (II. 8) dans (II. 3) on obtient :

$$A_1 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 + \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 \quad \text{(II. 68)}$$

Ce qui nous mène au résultat suivant :

$$A_3 = \frac{4v_1 v_2 e^{-ik_1 a}}{(v_1 + v_2)^2 e^{-ik_2 a} - (v_1 - v_2)^2 e^{+ik_2 a}} A_1 \quad \text{(II. 69)}$$

### II.2.2. Coefficient de transmission et de réflexion :

On introduit le coefficient de transmission T de la barrière :

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad \text{(II. 70)}$$

Car dans la région (I) et (III) du même vecteur d'onde. Ce qui conduit à :

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{4v_1 v_2 e^{-ik_1 a}}{(v_1 + v_2)^2 e^{-ik_2 a} - (v_1 - v_2)^2 e^{+ik_2 a}} \right|^2 \quad \text{(II. 71)}$$

Si  $E < V_0$  :

$$\text{On a } k_2 = \pm i \tilde{k}_2 \quad \text{(II. 72)}$$

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{4v_1 v_2 e^{-ik_1 a}}{(v_1 + v_2)^2 e^{\tilde{k}_2 a} - (v_1 - v_2)^2 e^{-\tilde{k}_2 a}} \right|^2 \quad \text{(II. 73)}$$

Si  $E > V_0$  :

$$T = \frac{(4v_1v_2)^2}{((v_1 + v_2)^2 e^{-ik_2a} - (v_1 - v_2)^2 e^{+ik_2a})(v_1 + v_2)^2 e^{+ik_2a} - (v_1 - v_2)^2 e^{-ik_2a}} \quad (\text{II. 74})$$

Après la simplification nous obtenons le coefficient ci-dessous :

$$T = \frac{(4v_1v_2)^2}{(v_1 + v_2)^4 + (v_1 - v_2)^4 - 2(v_1 + v_2)^2(v_1 - v_2)^2 \cos(2k_2a)} \quad (\text{II. 75})$$

Que l'on peut écrire également sous la forme :

$$T = \frac{(4v_1v_2)^2}{4(v_1v_2)^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2a)} \quad (\text{II. 76})$$

Finalement :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2}{4(v_1v_2)^2} \sin^2(k_2a)} \quad (\text{II. 77})$$

$$\frac{(v_1^2 - v_2^2)^2}{4(v_1v_2)^2} = \frac{[(m_1 - m_2)E - m_1V_0]^2}{4m_1m_2E(E - V_0)} \quad (\text{II. 78})$$

Et le coefficient de réflexion de la barrière s'écrit sous la forme :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{(v_2 + v_1)(v_2 + v_1)(e^{ik_2a} - e^{-ik_2a})}{((v_2^2 + v_1^2 + 2v_1v_2)e^{-ik_2a} - (v_2^2 + v_1^2 - 2v_1v_2)e^{ik_2a})} \right|^2 \quad (\text{II. 79})$$

En le simplifiant, on arrive à :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{(v_2 + v_1)(v_2 + v_1) \sin(k_2a)}{(v_1^2 + v_2^2) \sin(k_2a) + i2v_1v_2 \cos(k_2a)} \right|^2 \quad (\text{II. 80})$$

Que l'on peut écrire également sous la forme :

$$R = \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2a)}{(v_1^2 + v_2^2)^2 \sin^2(k_2a) + 4(v_1v_2)^2} \quad (\text{II. 81})$$

Si  $E > V_0$  On remplace  $v_1$  et  $v_2$  par leur valeur il vient :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(1 - \frac{m_2}{m_1}) \frac{E}{V_0} - 1)^2}{4 \frac{m_2}{m_1} \frac{E}{V_0} (\frac{E}{V_0} - 1)} \sin^2 \left( \pi \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right)} \quad (\text{II. 82})$$

On pose  $\frac{E}{V_0} = x$  trouver :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{\left(\frac{1-m_2}{m_1}\right)x-1)^2}{4\frac{m_2}{m_1}x(x-1)} \sin^2(\pi\sqrt{2(x-1)})} \quad (\text{II. 83})$$

Donc pour :  $\frac{m_2}{m_1} = 1$

$$T = \frac{4(x^2 - x)}{\sin^2(\pi\sqrt{2(x-1)}) + 4(x^2 - x)} \quad (\text{II. 84})$$

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

$$T = \frac{48(x^2 - x)}{(-11x - 1)^2 \sin^2(\pi\sqrt{2(x-1)}) + 48(x^2 - x)} \quad (\text{II. 85})$$

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

$$T = \frac{\left(\frac{1}{3}\right)(x^2 - x)}{\left(\left(1 - \frac{1}{12}\right)x - 1\right)^2 \sin^2(\pi\sqrt{2(x-1)}) + \left(\frac{1}{3}\right)(x^2 - x)} \quad (\text{II. 86})$$

Si  $E < V_0$  :

$$T = \frac{16}{\left(\left(\frac{m_2}{m_1}\right)\frac{\frac{E}{V_0}}{\left(1-\frac{E}{V_0}\right)} + \left(\frac{m_1}{m_2}\right)\frac{\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}{\frac{E}{V_0}} + 2\right)e^{2\pi\sqrt{2\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}}} \quad (\text{II. 87})$$

On pose  $\frac{E}{V_0} = x$  trouver :

$$T = \frac{16}{\left(\left(\frac{m_2}{m_1}\right)\frac{x}{(1-x)} + \left(\frac{m_1}{m_2}\right)\frac{(1-x)}{x} + 2\right)e^{2\pi\sqrt{2(1-x)}}} \quad (\text{II. 88})$$

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

$$T = \frac{16(x - x^2)}{e^{2\pi\sqrt{2(1-x)}}} \quad (\text{II. 89})$$

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

$$T = \frac{16}{\left(\frac{12x}{(1-x)} + \frac{(1-x)}{12x} + 2\right)e^{2\pi\sqrt{2(1-x)}}} \quad (\text{II. 90})$$

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

$$T = \frac{16}{\left(\frac{x}{12(1-x)} + \frac{12(1-x)}{x} + 2\right)e^{2\pi\sqrt{2(1-x)}}} \quad (\text{II. 91})$$

---

## ***Chapitre III:***

***Résolution de l'équation de Schrödinger  
généralisée pour un double potentiel et une  
masse rectangulaires***

### III.1. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double barrière de potentiel :

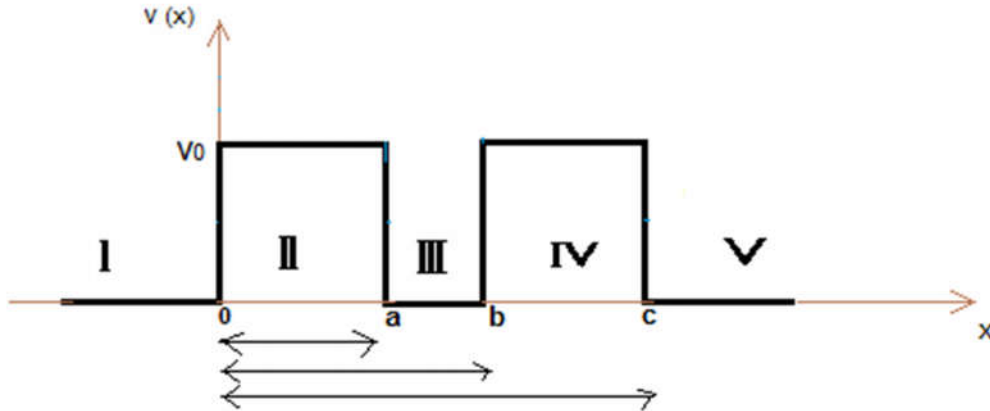


Figure (III.1)

Remarque : on pose  $b = 2a$ ,  $c = 3a$ .

pour  $E > V_0$ :

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

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{III.1})$$

Equation aux valeurs propres dans les régions est :

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_{II}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{III}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{IV}(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi_{IV}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_V(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_V(x) = 0 \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

Avec  $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

La forme générale de la solution de l'équation différentielle dans les régions est :

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \\ \psi_{IV}(x) = A_4 e^{ik_2 x} + A'_4 e^{-ik_2 x} \\ \psi_V(x) = A_5 e^{ik_1 x} \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

### III.1.1 Conditions de continuité :

Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée

( $\psi = \text{continue}$  et  $\frac{\psi'}{m}$  continue, choix de Lévy – Leblond)

#### Raccord des régions I et II :

Les conditions de continuité en  $x = 0$ , on a la continuité de la fonction :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\begin{cases} \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \\ K_1(A_1 - A'_1) = K_2(A_2 - A'_2) \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

Les conditions de continuité conduisent au système :

$$\begin{cases} (A_1 + A'_1) = (A_2 + A'_2) & (\text{III.5}) \\ (A_1 - A'_1) = \frac{K_2}{K_1} (A_2 - A'_2) & (\text{III.6}) \end{cases}$$

Avec l'addition de (III.5) et (III.6) nous avons l'équation (III.7) et nous avons l'équation (III.8) de la soustraction de (III.5) de (III.6) :

$$A_1 = \left(\frac{k_1+k_2}{2k_1}\right) A_2 + \left(\frac{k_1-k_2}{2k_1}\right) A'_2 \quad (\text{III.7})$$

$$A'_1 = \left(\frac{k_1-k_2}{2k_1}\right) A_2 + \left(\frac{k_1+k_2}{2k_1}\right) A'_2 \quad (\text{III.8})$$

#### Raccord des régions II et III :

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} + A'_3 e^{-ik_1 a}$$

Continuité de la dérivée en  $x = a$  :

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a} = \frac{k_1}{k_2} (A_3 e^{ik_1 a} - A'_3 e^{-ik_1 a})$$

Alors :

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2 a} + \acute{A}_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} + \acute{A}_3 e^{-ik_1 a} & \text{(III. 9)} \\ A_2 e^{ik_2 a} - \acute{A}_2 e^{-ik_2 a} = \frac{k_1}{k_2} (A_3 e^{ik_1 a} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 a}) & \text{(III. 10)} \end{cases}$$

En adition (III. 9)à (III. 10)nous avons eu la relation (III. 11)et nous avons eu l'équation (III. 12)de la soustraction de (III. 9) de (III. 10) :

$$\begin{cases} A_2 = \left( \frac{k_1+k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_1-k_2)a} A_3 + \left( \frac{k_2-k_1}{2k_2} \right) e^{-i(k_1+k_2)a} \acute{A}_3 & \text{(III. 11)} \\ A_2' = \left( \frac{k_2-k_1}{2k_2} \right) e^{i(k_1+k_2)a} A_3 + \left( \frac{k_1+k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_2-k_1)a} \acute{A}_3 & \text{(III. 12)} \end{cases}$$

### Raccord des régions III et IV :

La continuité de la fonction :

$$\psi_{\text{III}}(b) = \psi_{\text{IV}}(b) \Rightarrow A_3 e^{ik_1 b} + \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = A_4 e^{ik_2 b} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 b} \quad \text{(III. 13)}$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\psi'_{\text{III}}(b) = \psi'_{\text{IV}}(b) \Rightarrow A_3 e^{ik_1 b} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = \frac{k_2}{k_1} (A_4 e^{ik_2 b} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 b}) \quad \text{(III. 14)}$$

Alors :

Avec l'addition de (III. 13) et (III. 14) nous avons l'équation (III. 15) et nous avons l'équation (III. 16) de la soustraction de (III. 13)de (III. 14) :

$$A_3 = \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) e^{i(k_2-k_1)b} A_4 + \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) e^{-i(k_1+k_2)b} \acute{A}'_4 \quad \text{(III. 15)}$$

$$\acute{A}'_3 = \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)b} A_4 + \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)b} \acute{A}'_4 \quad \text{(III. 16)}$$

### Raccord des régions IV et V :

La continuité de la fonction :

$$\psi_{\text{IV}}(c) = \psi_{\text{V}}(c) \Rightarrow A_4 e^{ik_2 c} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = A_5 e^{ik_1 c}$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\psi'_{\text{IV}}(c) = \psi'_{\text{V}}(c) \Rightarrow A_4 e^{ik_2 c} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = \frac{k_1}{k_2} A_5 e^{ik_1 c}$$

$$\begin{cases} A_4 e^{ik_2 c} + A_4' e^{-ik_2 c} = A_5 e^{ik_1 c} & \text{(III. 17)} \\ A_4 e^{ik_2 c} - A_4' e^{-ik_2 c} = \frac{k_1}{k_2} A_5 e^{ik_1 c} & \text{(III. 18)} \end{cases}$$

Avec l'addition de (III. 17)et (III. 18)nous avons l'équation (III. 19)et nous avons l'équation (III. 20)de la soustraction de (III. 17)de (III. 18) :

$$\begin{cases} A_4 = \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)c} A_5 & \text{(III. 19)} \\ A_4' = \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)c} A_5 & \text{(III. 20)} \end{cases}$$

### III.1.2 Coefficient de transmission :

On a dans la région (I) et (V) du même vecteur d'onde donc :

$$T = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 \quad \text{(III. 21)}$$

$$\begin{aligned} T = & \left\| \left[ \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right] \left[ \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left. \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} \right] \right. \\ & + \left. \left[ \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{-i(k_1 + k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left. \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(k_2 - k_1)a} \right] \left[ \left( \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_2} \right) e^{i(5k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) \left( \frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{i(5k_1 + k_2)a} \right] \right\|^2 \end{aligned} \quad \text{(III. 22)}$$

On remplace  $k_1$  et  $k_2$  par leur valeur il vient :



Si  $E < V_0$  :

$$\begin{aligned}
 T = & \left| 1 / \left( \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \right. \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 \right. \right. \\
 & + i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left. \right) \left. \right) \\
 & + \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( 1 - \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & + i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \\
 & \left. \left. \left. + \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{E}{V_0} + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-E}{V_0} + 1} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \right) \right) \right)^2
 \end{aligned}$$

(III. 25)

On pose  $\frac{E}{V_0} = x$  il vient :

$$\begin{aligned}
 T = & \text{Norm} \left[ 1 / \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} + 1 \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2x} + \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] + \frac{1}{4} \left( 1 - i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & - \left. \left. \left. \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2x} - \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} + 1 \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2x} \right. \right. \right. \right. \\
 & + \left. \left. \left. \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] + \frac{1}{4} \left( 1 - i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( 1 - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2x} - \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] \right) + \frac{1}{4} \left( 1 \right. \right. \\
 & - \left. \left. \frac{1}{i} \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} + 1 \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -\sqrt{2(-x+1)} - i \sqrt{2x} \right) \right] + \frac{1}{4} \left( 1 + i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( 1 \right. \right. \\
 & - \left. \left. \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -i \sqrt{2x} + \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( 1 + i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( 1 - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2x} \right. \right. \right. \right. \\
 & - \left. \left. \left. \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] + \frac{1}{4} \left( 1 - i \sqrt{\frac{-x+1}{x}} \right) \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x}{-x+1}} + 1 \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2x} + \sqrt{2(-x+1)} \right) \right] \right) \right) \right)^2
 \end{aligned}$$

(III. 26)

### III.2. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour unpotentiel et une masse rectangulaires :

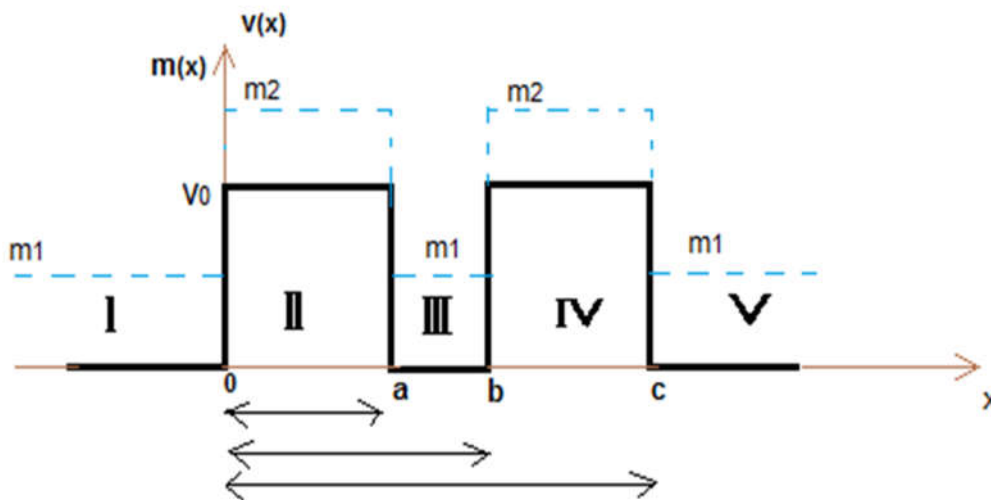


Figure (III.2)

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

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{III. 27})$$

pour  $E > V_0$ :

Equation aux valeurs propres dans les régions est :

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2}\psi_I(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2}(E - V)\psi_{II}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2}\psi_{III}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_{IV}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2(E - V)}{\hbar^2}\psi_{IV}(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi_V(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2}\psi_V(x) = 0 \end{cases} \quad (\text{III. 28})$$

Avec  $k_1^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2}$

La solution générique dans les régions est :

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A_1e^{ik_1x} + \hat{A}_1e^{-ik_1x} \\ \psi_{II}(x) = A_2e^{ik_2x} + \hat{A}_2e^{-ik_2x} \\ \psi_{III}(x) = A_3e^{ik_1x} + \hat{A}_3e^{-ik_1x} \\ \psi_{IV}(x) = A_4e^{ik_2x} + \hat{A}_4e^{-ik_2x} \\ \psi_V(x) = A_5e^{ik_1x} \end{cases} \quad (\text{III. 29})$$

### III.2.1 Conditions de continuité :

Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée

( $\psi$  continue et  $\frac{\psi'}{m}$  continue, choix de Lévy – Leblond)

#### Raccord des régions I et II :

Les conditions de continuité en  $x=0$

La continuité de la fonction :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$$

La continuité de la dérivée de la fonction sur la masse

$$\begin{cases} \frac{1}{m_1} \psi'_I(0) = \frac{1}{m_2} \psi'_{II}(0) \\ \frac{k_1}{m_1} (A_1 - A'_1) = \frac{k_2}{m_2} (A_2 - A'_2) \end{cases} \quad (\text{III. 30})$$

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

Les conditions de continuité conduisent au système :

$$\begin{cases} (A_1 + A'_1) = (A_2 + A'_2) & (\text{III. 31}) \\ (A_1 - A'_1) = \frac{v_2}{v_1} (A_2 - A'_2) & (\text{III. 32}) \end{cases}$$

Avec l'addition de (III .31) et (III .32) nous avons l'équation (III .33) et nous avons l'équation (III .34) de la soustraction de (III .31) de (III .32) :

$$A_1 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) A_2 + \left( \frac{v_1 - v_2}{2k_1} \right) A'_2 \quad (\text{III. 33})$$

$$A'_1 = \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) A_2 + \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) A'_2 \quad (\text{III. 34})$$

#### Raccord des régions II et III :

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_2 a} + A'_3 e^{-ik_1 a}$$

Continuité de la dérivée / masse en  $x = a$  :

$$\frac{1}{m_2} \psi'_{II}(a) = \frac{1}{m_1} \psi'_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 a} - \acute{A}_2 e^{-ik_2 a} = \frac{v_1}{v_2} (A_3 e^{ik_1 a} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 a})$$

Alors :

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2 a} + \acute{A}_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_2 a} + \acute{A}_3 e^{-ik_1 a} & \text{(III. 35)} \\ A_2 e^{ik_2 a} - \acute{A}_2 e^{-ik_2 a} = \frac{v_1}{v_2} (A_3 e^{ik_1 a} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 a}) & \text{(III. 36)} \end{cases}$$

En adition (III .35) à (III .36) nous avons eu la relation (III .37) et nous avons eu l'équation (III .38) de la soustraction de (III .35) de (III .36) :

$$\begin{cases} A_2 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 + \left( \frac{v_2 - v_1}{2k_2} \right) e^{-i(k_1 + k_2)a} \acute{A}_3 & \text{(III. 37)} \\ \acute{A}'_2 = \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 + \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_2 - k_1)a} \acute{A}_3 & \text{(III. 38)} \end{cases}$$

### Raccord des régions III et IV :

La continuité de la fonction :

$$\psi_{III}(b) = \psi_{IV}(b) \Rightarrow A_3 e^{ik_1 b} + \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = A_4 e^{ik_2 b} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 b}$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\frac{1}{m_1} \psi'_{III}(b) = \frac{1}{m_2} \psi'_{IV}(b) \Rightarrow A_3 e^{ik_1 b} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = \frac{v_2}{v_1} (A_4 e^{ik_2 b} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 b})$$

Alors :

$$\begin{cases} A_3 e^{ik_1 b} + \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = A_4 e^{ik_2 b} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 b} & \text{(III. 39)} \\ A_3 e^{ik_1 b} - \acute{A}_3 e^{-ik_1 b} = \frac{v_2}{v_1} (A_4 e^{ik_2 b} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 b}) & \text{(III. 40)} \end{cases}$$

Avec l'addition de (III .39) et (III .40) nous avons l'équation (III .41) et nous avons l'équation (III .42) de la soustraction de (III .39) de (III .40) :

$$A_3 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) e^{i(k_2 - k_1)b} A_4 + \left( \frac{v_1 - v_2}{2k_1} \right) e^{-i(k_1 + k_2)b} \acute{A}'_4 \quad \text{(III. 41)}$$

$$\acute{A}'_3 = \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) e^{i(k_1 + k_2)b} A_4 + \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) e^{i(k_1 - k_2)b} \acute{A}'_4 \quad \text{(III. 42)}$$

### Raccord des régions IV et V :

La continuité de la fonction :

$$\psi_{IV}(c) = \psi_V(c) \Rightarrow A_4 e^{ik_2 c} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = A_5 e^{ik_1 c}$$

La continuité de la dérivée de la fonction :

$$\frac{1}{m_2} \psi'_{IV}(c) = \frac{1}{m_1} \psi'_V(c) \Rightarrow A_4 e^{ik_2 c} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = \frac{v_1}{v_2} A_5 e^{ik_1 c}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4 e^{ik_2 c} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = A_5 e^{ik_1 c} \\ A_4 e^{ik_2 c} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = \frac{v_1}{v_2} A_5 e^{ik_1 c} \end{array} \right. \quad \text{(III. 43)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4 e^{ik_2 c} + \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = A_5 e^{ik_1 c} \\ A_4 e^{ik_2 c} - \acute{A}_4 e^{-ik_2 c} = \frac{v_1}{v_2} A_5 e^{ik_1 c} \end{array} \right. \quad \text{(III. 44)}$$

Avec l'addition de (III .43) et (III .44) nous avons l'équation (III .45) et nous avons l'équation (III .46) de la soustraction de (III .43) de (III .44) :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)c} A_5 \\ A'_4 = \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)c} A_5 \end{array} \right. \quad \text{(III. 45)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4 = \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)c} A_5 \\ A'_4 = \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)c} A_5 \end{array} \right. \quad \text{(III. 46)}$$

### III.2.2 Coefficient de transmission :

On a dans la région (I) et (V) du même vecteur d'onde donc :

$$T = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2$$

$$\begin{aligned} T = & \left| \left[ \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right] \left[ \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left. \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} \right] \right. \\ & + \left. \left[ \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{-i(k_1 + k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left. \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(k_2 - k_1)a} \right] \left[ \left( \frac{v_1 - v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_2} \right) e^{i(5k_1 - k_2)a} \right. \right. \\ & + \left. \left. \left( \frac{v_1 + v_2}{2v_1} \right) \left( \frac{v_2 - v_1}{2v_2} \right) e^{i(5k_1 + k_2)a} \right] \right|^2 \end{aligned}$$

(III. 47)

On remplace  $v_1$  et  $v_2$  par leur valeur il vient :

$$\begin{aligned}
 T = & \left| 1 / \left( \left( \frac{1}{4} \left( \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 + \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} - \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right. \right. \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 \right. \\
 & \left. \left. - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \text{Exp} \left[ i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} + \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right) \left( \frac{1}{4} \left( \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \text{Exp} \left[ i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} - \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{4} \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} + \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right) \right) \\
 & + \left( \frac{1}{4} \left( \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} - \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{4} \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \text{Exp} \left[ -i\pi \left( \sqrt{2\frac{E}{V_0}} + \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right) \left( \frac{1}{4} \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \text{Exp} \left[ i\pi \left( 5\sqrt{2\frac{E}{V_0}} + \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{4} \left( \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0} - 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 - \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0} - 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ i\pi \left( 5\sqrt{2\frac{E}{V_0}} - \sqrt{2\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right) \right] \right) \right) \right) \right) \right|^2
 \end{aligned}$$

(III. 48)

 Si  $E < V_0$  :

$$\begin{aligned}
 T = & \left| 1 / \left( \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \right. \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\
 & + i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left. \right) \left. \right) \\
 & + \left( \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \right. \\
 & + \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( -i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \left( \frac{1}{4} \left( 1 \right. \right. \\
 & - \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right)} \right) \left( 1 + i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} - \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{4} \left( \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\frac{E}{V_0}}{-\frac{E}{V_0} + 1} \left( \frac{m_2}{m_1} \right) + 1} \right) \left( 1 - i \sqrt{\frac{-\frac{E}{V_0} + 1}{\frac{E}{V_0}} \left( \frac{m_1}{m_2} \right)} \right) \text{Exp} \left[ \pi \left( 5i \sqrt{2 \frac{E}{V_0}} + \sqrt{2 \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right) \right] \right) \right) \right) \right)^2
 \end{aligned}$$

(III. 49)

## ***Chapitre IV :***

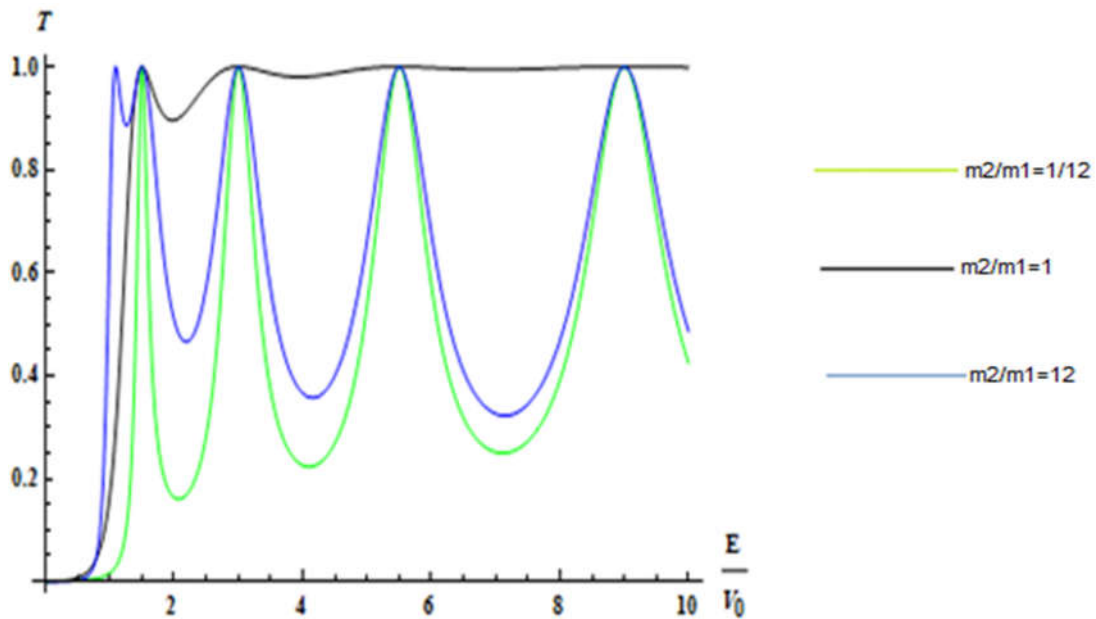
### ***Résultats numériques et discussions***

Le coefficient de transmission mesure l'importance relative du phénomène de transmission. En général c'est une fonction croissante de l'énergie qui tend vers l'unité lorsque l'énergie tend vers l'infini. On peut dire qu'à cette limite, on retrouve le résultat de la mécanique classique qui prévoit une transmission complète dans le cas où l'énergie de la particule incidente est supérieure à la hauteur de la barrière de potentiel.

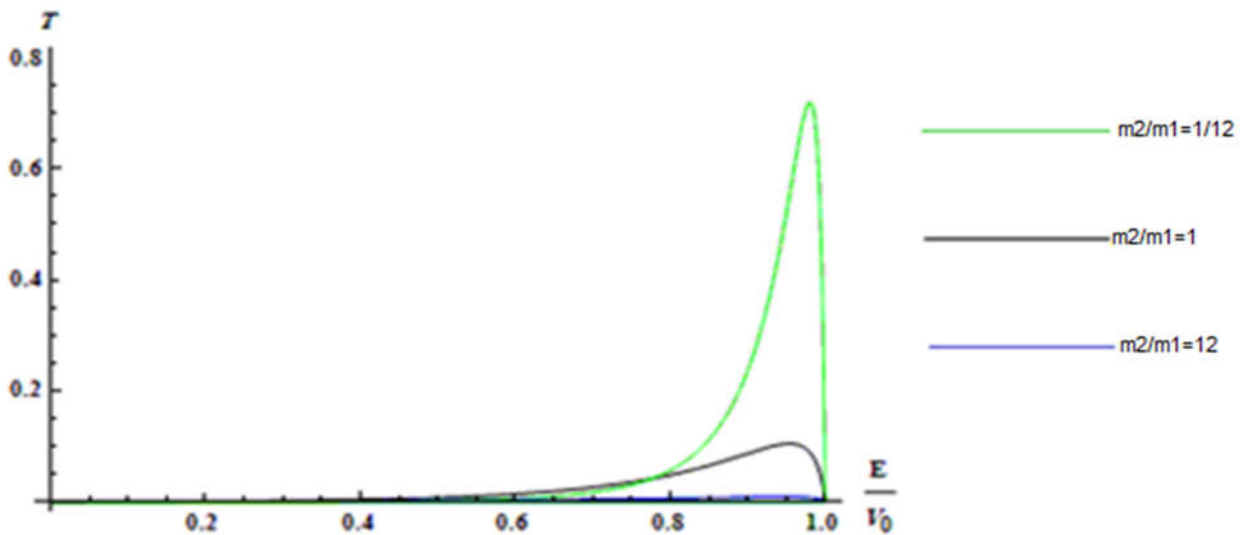
On remarque que le coefficient de transmission est une fonction symétrique des vecteurs d'onde  $k_1$  et  $k_2$  des deux côtés de la barrière. Une onde de même énergie mais se propageant en sens opposé (de II vers I) a donc même coefficient de transmission : il est aussi indépendant du sens de parcours.

Tous ces résultats ne peuvent surprendre lorsqu'on réalise la grande ressemblance avec les phénomènes de propagation d'une onde lumineuse. Le problème traité ici est analogue à celui de la propagation d'un signal lumineux à travers deux milieux d'indices de réfraction différents.

**IV.1. Les courbes des coefficients de transmission pour une barrière du potentiel et une masse rectangulaires :**



**Figure (IV.1):** Variation du coefficient de transmission à travers une barrière du potentiel et la masse en fonction de l'énergie, ( $E > V_0$ )



**Figure (IV.2) :** Variation du coefficient de transmission à travers une barrière du potentiel et la masse en fonction de l'énergie, ( $E < V_0$ )

Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1} = 1$

pour  $E < V_0$ , à partir de la valeur  $E/V = 0.4$  le coefficient de transmission commence à augmenter avec l'augmentation de l'énergie jusqu'à  $E = 0.97 V_0$  puis il ralentit pour atteindre la valeur zéro quand  $E = V_0$ , nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu 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  $E = 3 V_0$

Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{12}$

Pour  $E < V_0$  le coefficient de transmission est soumis à une vibration à partir de la valeur  $E = 0.5 V_0$  commence par l'augmentation avec l'augmentation de l'énergie à la fin  $E = 0.95 V_0$  puis ralentir pour atteindre la valeur de zéro à la puissance  $E = V_0$ , nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu effet tunnel.

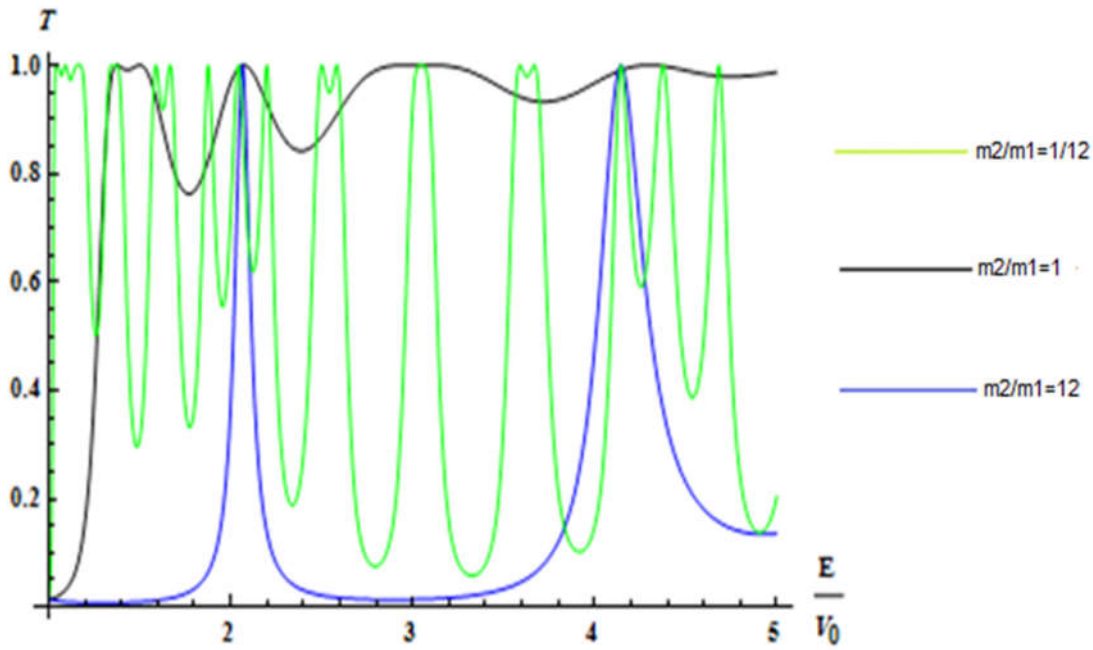
Pour  $E > V_0$ , le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale et l'unité. Plus l'énergie augmente et plus les minima du coefficient de transmission augmentent. On retrouve bien l'analogie avec la transmission optique d'un interféromètre de Fabry – Pérot.

Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1} = 12$

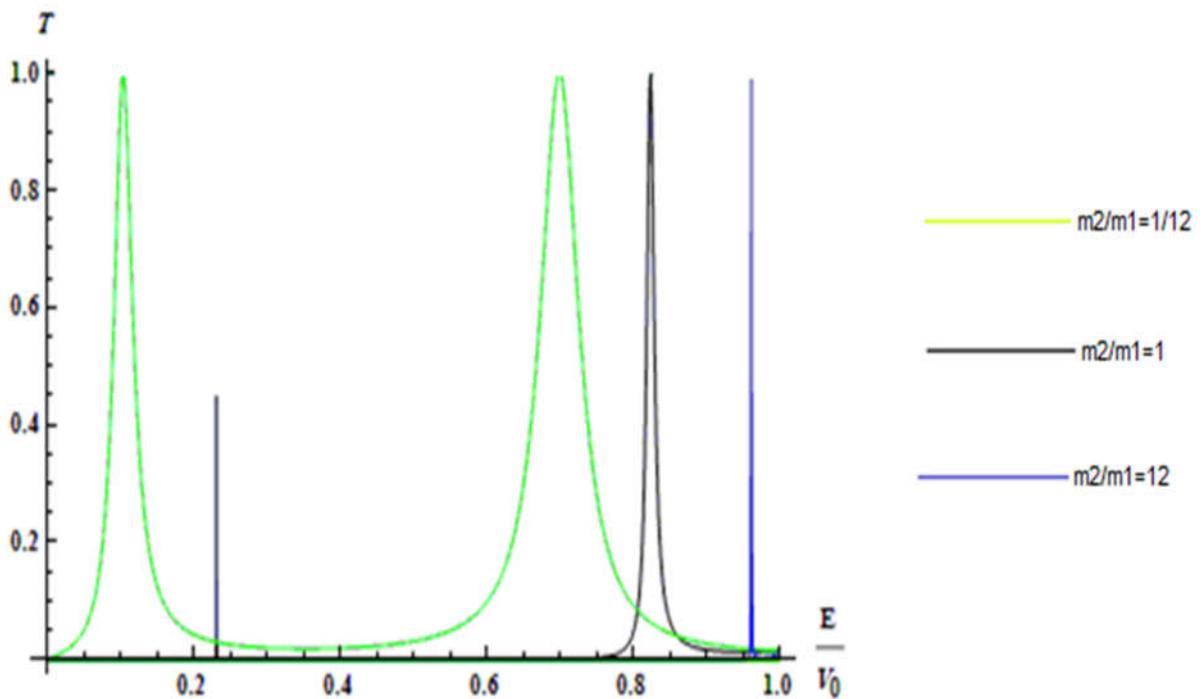
Pour  $E < V_0$  Le coefficient de transmission est presque à partir de la valeur  $E = 0.5 V_0$  commence à augmenter lentement avec l'augmentation de l'énergie, puis disparaît à la valeur  $E = V_0$ , nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu effet tunnel.

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.

**IV.2. Les courbes des coefficients de transmission pour une double barrière de potentiel et une masse rectangulaires :**



**Figure (IV.3) :** Variation du coefficient de transmission à travers une double barrière du potentiel et la masse en fonction de l'énergie, ( $E > V_0$ )



**Figure (IV.4) :** Variation du coefficient de transmission à travers une double barrière du potentiel et masse en fonction de l'énergie, ( $E < V_0$ )

Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1}=1$

Pour  $E < V_0$  le coefficient de transmission est soumis chez la valeur  $E = 0.24V_0$  à une augmentation rapide (soudaine) et n'est alors pas à la même valeur de l'énergie au point  $E = 0.8 V_0$  où il est soumis à une vibration qui paralyse sa hauteur à l'unité, puis est perdue à la valeur  $E = 0.9 V_0$ , nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu 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  $E = 4V_0$ .

Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{12}$

Pour  $E < V_0$  Le coefficient de transmission fluctue régulièrement entre la valeur minimale et l'unité où après la première atténuation se révèle légèrement entre les énergies  $E = 0.2 V_0$  et  $E = 0.6 V_0$  et après la seconde secousse, la valeur est perdue à la valeur  $E = 0.9 V_0$ , nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu effet tunnel.

Pour  $E > V_0$ , pour des petites énergies le coefficient de transmission oscille d'une manière chaotique rapide entre la valeur minimale et l'unité.

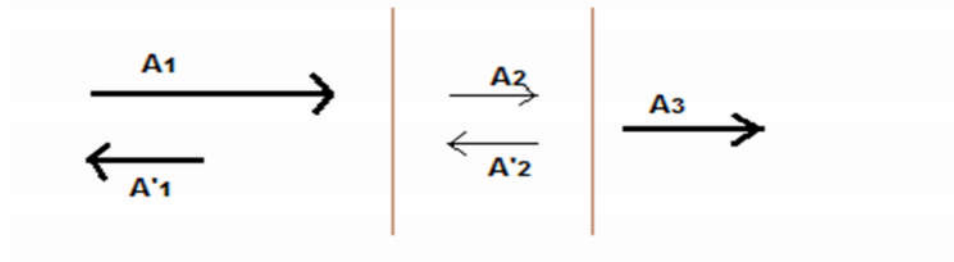
Dans le cas  $\frac{m_2}{m_1}=12$

Pour  $E < V_0$  le coefficient de transmission est nul à  $E = 0.9 V_0$  tel qu'est sujet à une augmentation rapide et est presque absent à la même valeur d'énergie, nous notons la transmission bien que  $E < V_0$ , cela soit connu effet tunnel.

Pour  $E > V_0$ , Le coefficient de transmission oscille régulièrement entre l'unité et une fonction enveloppe inférieure. Aux grandes énergies le coefficient se rapproche de plus en plus de l'unité. On observe aussi que ses minima sont toujours inférieurs au cas précédent  $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{12}$

### IV. 3. L'interprétation physique :

**Pour  $E > V_0$  :** La fonction d'onde  $\psi(x)$  représente une onde incident, issue de la région I. Cette onde est partiellement réfléchiée et partiellement transmise dans la région III. Les coefficients R et T sont les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude de l'onde.



**Figure (IV.5)** Des constantes d'intégration

Le flux incident est  $|A_1|^2 \frac{\hbar k}{m}$ , le flux transmis dans la région III est  $|A_3|^2 \frac{\hbar k}{m}$ . Le coefficient de transmission en intensité est le rapport de ces deux flux, il vaut  $|T|^2$ . De même, le coefficient de réflexion en intensité est  $|R|^2$ . La relation  $|R|^2 + |T|^2 = 1$  peut être vérifiée à partir de l'expression de R et T. Elle assure la conservation du nombre de particules : le nombre de particules qui pénètrent dans la barrière est égal aux nombre de particules qui en sortent pendant le même temps

De même, on peut démontrer la conservation du nombre de particules à l'interface entre deux régions voisines. Entre les régions I et II par exemple, au nombre de particules qui s'éloignent de ce même point pendant le même temps :

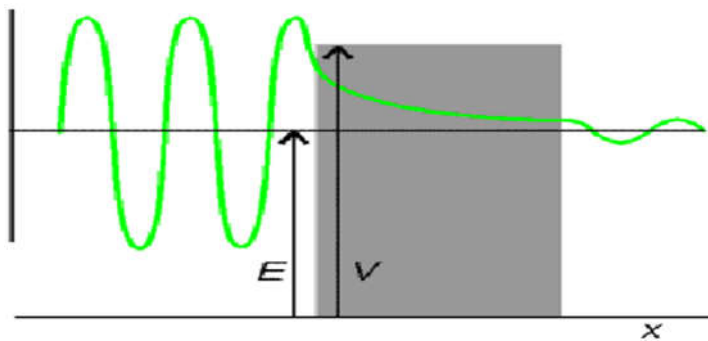
$$|A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} + |A_2|^2 \frac{\hbar k_2}{m} = |A'_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} + |A'_2|^2 \frac{\hbar k_2}{m}$$

L'expression  $T(\frac{E}{V_0})$  du coefficient de transmission montre que celui-ci est toujours inférieur ou égal à l'unité. Pour  $|T|^2 = 1$  la transmission est totale; le coefficient de réflexion est alors nul. Ceci se produit pour  $2k_2 a = N\pi$ , où  $N$  est un entier. En introduisant,  $\lambda'$  longueur d'onde de Broglie dans la région II, il vient  $2a = N \frac{\lambda'}{2}$ . C'est une condition semblable que l'on impose aux couches antireflet ; dans ce cas ce sont des ondes lumineuses qui sont concernées et non des ondes de matière mais l'analogie méritait d'être soulignée. Lorsque la transmission est totale, la barrière introduit, sur l'onde incidente, un déphasage en  $x = a$ , mais n'en modifie pas l'amplitude.

**Pour  $E < V_0$ :** Dans le cadre de la théorie classique, l'énergie cinétique des particules dans la région I est E. Cette valeur est insuffisante pour que les particules issues de la région I passent dans la région II où leur énergie potentielle  $V_0$ , serait supérieure à E. Les particules sont toutes réfléchies. La situation est différente dans le cadre de la mécanique ondulatoire où la barrière

de potentiel présente un coefficient de transmission non nul. Cet effet est appelé "effet tunnel".

L'image véhiculée par cette dénomination est la suivante. Pour qu'un véhicule passe un col de montagne sur son élan, il faut qu'il possède, au pied de la montagne, une énergie cinétique,  $E$ , supérieure (ou égale) à l'énergie potentielle, qu'il aura au sommet du col. A cette seule condition le véhicule pourra passer sur l'autre versant de la montagne. Si ce n'est pas le cas (Pour  $E < V_0$ ), le véhicule peut atteindre l'autre versant de la montagne en empruntant un tunnel.



**Figure (IV.6)** effet tunnel

Une particule est décrite par la fonction d'onde  $\psi(x)$ . Dans la région I, l'onde est la superposition d'une onde incidente dont le courant est  $|A_1|^2 \frac{\hbar k}{m}$  et d'une onde réfléchie de courant  $|A_1'|^2 \frac{\hbar k}{m}$ , le courant transmis dans la région III est alors  $|A_3|^2 \frac{\hbar k}{m}$ . La conservation du nombre de particules s'écrit encore  $|R|^2 + |T|^2 = 1$ . Dans la région II, intermédiaire, règne une onde évanescente. On vérifie aisément l'absence de tout courant.

## *Conclusion générale*

Dans notre sujet en appliquant l'Hamiltonien généralisé, nous avons étudié des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position, ce qui a été l'objet de beaucoup d'activité de recherches. Ces modèles sont très importants dans la vie pratique telle que la description des propriétés électroniques des semi-conducteurs, en physique nucléaire, en physique de la matière condensée, dans le domaine des cristaux liquide ainsi que dans les théories des puits et points quantiques.

Dans le chapitre 1 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 (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 les chapitres 2 et 3 nous avons étudié la résolution de l'équation de Schrödinger généralisé indépendant du temps pour une barrière potentiel rectangulaire et double potentiel rectangulaires et en masse, nous avons effectués un calcul analytique des fonctions d'onde ainsi que les coefficients de transmission et de réflexion avec une énergie inférieur et supérieur du potentiel.

Le quatrième chapitre est consacré à l'illustration et la discussion de nos résultats. Nous y présentons des courbes de coefficients de transmission en fonction de l'énergie pour toutes les configurations de potentiels et de masses étudiées dans le chapitre précédent, et ainsi proposé l'interprétation physique.

## ***Référence :***

- [1] G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Hetero structure, 1988, Les Ulis: Editions de Physique.
- [2] L. I. Serra and E. Lipparini, Spin response of unpolarized quantum dots, Europhys. Lett. 40, 667-672 (1997).
- [3] Levai G., Solvable potentials associated with SU (1, 1) algebras: a systematic study, J. Phys. A: Math. Gen. 27, 3809-3828 (1994).
- [4] M. Barranco, M. Pi, S. M. Gatica, E. S. Hernandez and J. Navarro, Structure and energetics of mixed 4He-3He drops, Phys. Rev. B 56, 8997-9003 (1997)
- [5] 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)
- [6] Puente A., A. Serra and Casas M., Dipole excitation of Na clusters with a non-local energy density functional, Zeitschrift für Physik D 31, 283-286 (1994).
- [7] R.A. Morrow and K.R. Brownstein, Model effective-mass Hamiltonians for abrupt hetero junctions and the associated wave-function-matching condition, Phys.Rev.B30678-680(1984).
- [8] T.Tanaka,j.Phys.A:Math.theor.39,219(2006)
- [9] O. Von Roos, Position-dependent effective masses in semiconductor theory, Phys .Rev. B 27, 7547-7552 (1983)
- [10] D.J. Ben Danial, C.B. Duke, Space-Charge Effects on Electron Tunneling, Phys. Rev. 152, 683-692 (1966)
- [11] T. Gora, F. Williams, Theory of Electronic States and Transport in Graded Mixed Semiconductors, Phys. Rev. 177, 1179-1182 (1969)
- [12] O. Mustafa, S. Habib Mazharimousavi, Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators, Int. J. Theory. Phys. 46 ,1786-1796 (2007)
- [13] O. Von Roos and H. Mavromatis, position-dependent effective masses in semiconductors theory. II, Phys.Rev.B31, 2294-2298(1985).
- [14] A.Arda and R. Sever, theor .Phys, Vol 56,Issue 1,51,(2011).
- [15] O. Von Roos, Phys. Rev. B 27 ,7547(1983)

- [16] D.de Souza,j.Phys.A:Math.theor.39,203(2006)
- [17] M. Sassoli de Bianchi and M. Di Ventura, On remark on the high-energy limit of the one dimensional scattering problem with position dependent mass, Solid State Communications, Vol 106; N°5, 249-251 (1998)
- [18] 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).
- [19] Kamel. Bouzaine, « la barrière de potentiel dans le cadre du principe d'incertitude généralisé » mémoire master, université de m'sila, 2013.
- [20] Mohamed Lamine Benfoula, « effet tunnel, calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'ammoniac application au maser à ammoniac », Mémoire de Magister ,Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen.

## ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الهاميلتوني العامة من اجل كمون وكتلة متعلقة بالموضع (PDM).  
واسهامات مختلف الباحثين في هذا المجال ' وقدمنا الحلول التحليلية لمعادلة شرودينغر ومعامل  
النفوذ (الانتقال). والنتائج العددية لتغير معامل النفوذ بدلالة الطاقة وتفسير مختلف النتائج. حيث  
تناولنا اختيار بن دانيال ديك ( $\alpha = \gamma = 0$  et  $\beta = 1$ ) من اجل حاجز كموني وحاجزين  
وكتلة متغيرة (شكل مستطيل) .

## Résumé :

Dans ce travail, nous avons présenté une étude de l'Hamiltonien généralisé avec le choix de Ben Daniel ( $\alpha = \gamma = 0$  et  $\beta = 1$ ) pour un potentiel et masse dépendant de la position (PDM), et ses solutions analytiques de l'équation de Schrödinger associé. Nous avons calculé les coefficients de transmission par la suite et ses solutions numériques en fonction de l'énergie, pour une barrière de potentiel, double barrière et en masse.

## Abstract :

In this work, we presented a generalized Hamiltonian study with the choice of Ben Daniel ( $\alpha = \gamma = 0$  and  $\beta = 1$ ) for a potential and position-dependent mass (PDM), and his analytic solutions of Schrödinger equation associated. We calculated the transmission coefficients thereafter and its numerical solutions as a function of energy, for a potential barrier, double barrier and mass.