



N° d'ordre :/2016

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique des Particules à haute Energie**

Par

BOUNAB ASMA

THEME

Hamiltonien généralisé à des masses dépendent de la position

Soutenu le : 04 /06/2016

Devant le jury composé de :

A. Ghomaidh	MAA Univ. de M'sila	Président
K. Bouferrache	MAB Univ. de M'sila	Rapporteur
S. Madjber	MAA Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

Remerciements

*Je remercie Dieu tout puissant de m'avoir donné
le courage, la santé, la patience jusqu'à
l'achèvement de ce mémoire*

*Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde
gratitude à Monsieur: **K. Bouferrache**, mon
promoteur.*

*Je le remercie pour sa gentillesse et sa disponibilité,
j'ai eu le grand plaisir de travailler sous sa
direction.*

*Mes remerciements à tous les membres de jury qui ont
acceptés de juger ce travail et d'y apporter leurs
cautions.*

*Mes remerciements vont aussi à tous ceux qui ont
contribué de près ou de loin à la concrétisation de
ce travail pour leurs conseils, leurs
encouragements et leurs soutiens.*

*Mes remerciements vont également à tous les
enseignants du département de physique et mes
collègues de promotion Physique Master (2) de
l'année 2016.*

Dédicace

Je remercie le Bon-Dieu pour m'avoir donné la force d'accomplir ce travail pour
aller plus loin In Chaa Allah.

Je dédie ce travail à mes parents, pour leurs encouragement et leurs aide, et soutien
et surtout les sacrifices qu'ils ont fait pour nous voir réussir.

Je le dédie aussi à mes frères **AMINE** et **ANIS** et sœurs **SALSABIL** et **NAZIHA**

A tous mes amis **SOUHILA, ASIA, ABLA, ASMA, KHADIDJA, MOUNA,**
SORIYA, IMANE et mes professeurs sans exception

A tous ceux et celles qui m'ont aidé et encouragé de près comme de loin

A tous les enseignants de département de Physique a l'université de M'sila

Table des matière

INTRODUCTION GENERALE.....	1
-----------------------------------	----------

Chapitre I

I. HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

I.1. HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE.....	3
I.1.1.INTRODUCTION.....	3
I.1.2. Apport de Von Roos (1982).....	3
I.1.3. Contribution de Jean-Marc Lévy-Leblond (1995).....	4
I.1.4. Apport de L.Dekar et L.Chetouani et T.F Hammann (1999).....	6
I.1.5. Dutra et Almeida (2000).....	6
I.1.6.Apport Mustafa et Mazharimousavi (2007).....	7
I.2.L'EQUATION DE SCHRÖDINGER GENERALISEE.....	7
I.2.1. preuve l'équation de Schrödinger avec une masse variable.....	7

Chapitre II

II. CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

II.1.INTRODUCTION.....	10
II.2. RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER GENERALISEE POUR UNE MARCHE EN POTENTIEL ET EN MASSE.....	10
II.2.1. Solution dans la région I.....	11
II.2.2. Solution dans la région II.....	12
II.2.3. Conditions de continuité.....	12
II.2.4. Coefficient de transmission et de réflexion.....	13
II.3. RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRODINGER GENERALISEE POUR UN POTENTIEL ET UNE MASSE RECTANGULAIRES.....	15
II.3.1. Solution dans la région I.....	17

II.3.2. Solution dans la région II.....	17
II.3.3. Solution dans la région III.....	18
II.3.4. Conditions de continuité.....	18
II.3.4.1. Raccord des régions I et II.....	18
II.3.4.2. Raccord des régions II et III.....	19
II.3.5. Coefficients de transmission et de réflexion.....	20

**II.4. RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER GENERALISÉE POUR
UNE DOUBLE BARRIERE RECTANGULAIRE EN POTENTIEL ET EN**

MASSE.....	22
II.4.1. Solution dans la région I.....	23
II.4.2. Solution dans la région II.....	24
II.4.3. Solution dans la région III.....	24
II.4.4. Solution dans la région (IV).....	24
II.4.5. Solution dans la région (V).....	24
II.4.6. Conditions de continuité.....	25
II.4.6.1. Raccord des régions I et II.....	25
II.4.6.2. Raccord des régions II et III.....	25
II.4.6.3. Raccord des régions III et (IV).....	26
II.4.6.4. Raccord des régions (IV) et (V).....	26
II.4.7. Coefficient de transmission (T) et de réflexion(R).....	27

Chapitre III

III. RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSIONS

III.1.INTRODUCTION.....	31
III.2. GRAPHES DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSIONS ET LEUR ANALYSES	31
III.2.1. Marche en potentiel et en masse	31
III.2.2. Potentiel et masse rectangulaires	32
CONCLUSION	34
BIBLIOGRAPHIE.....	35

INTRODUCTION GENERALE :

Ces dernières années, l'étude des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position (*Position Dependent Mass* \equiv **PDM**) a connue une grande activité (voir bibliographie). Ces systèmes ont de larges applications en physique de la matière condensée, dans la théorie des semi-conducteurs [1-3], la physique nucléaire [4], dans les théories des puits et points quantiques [5] et dans d'autres domaines connexes, Dans les recherches théoriques, de nombreuses méthodes développées pour l'étude des systèmes à masse constante ont été généralisées pour les systèmes **PDM** aboutissant à un certain nombre de nouveaux résultats très intéressants. La recherche de solutions exactes des équations d'ondes quantiques (Schrödinger, Klein-Gordan, et Dirac) pour ces systèmes est un aspect important [6 - 13]. La méthode des opérateurs [14, 15], la méthode de factorisation [16], les méthodes de transformation de coordonnées [17,18], la mécanique quantique supersymétrique [19,20], l'approche par l'algèbre de Lie [21], celle par les intégrales de chemin [22-24], utilisés pour résoudre les équations d'ondes quantiques avec une masse constante, ont été étendues aux systèmes de **PDM**.

Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger avec masse effective dépendant de la position et pour certaines formes de potentiels physiques ont beaucoup attiré l'attention ces dernières années [25 - 29].

Pour un système à masse dépendant de la position, les opérateurs masse et impulsion ne commutent plus. Se pose le problème du choix de l'ordre correct des opérateurs masse et impulsion dans l'opérateur 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 [30]. Von Roos [31] a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H = \frac{1}{4}(m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + v$$

Où α, β, γ sont des paramètres, vérifiant $\alpha + \beta + \gamma = -1$, souvent appelés paramètres d'ambiguïté. Par construction l'hamiltonien de Von Roos est hermétique.

Différentes formes de l'hamiltonien sont employées selon les choix de l'ensemble des paramètres d'ambiguïté. Ainsi Gora et Williams [32] ont choisi $\alpha = -1, \beta = \gamma = 0$,

INTRODUCTION GENERALE

Ben Daniel et Duke [33] avait opté pour $\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$, Zhu et Kroemer [34] pour $\alpha = \gamma = -\frac{1}{2}, \beta = 0$, Li et Kuhn [35] pour $\alpha = 0, \beta = \gamma = -\frac{1}{2}$, et enfin très récemment Mustafa et Mazharimousavi [36] ont eux proposé, $\alpha = \gamma = -\frac{1}{4}, \beta = -\frac{1}{2}$. Le problème est de savoir si on peut arriver à choisir une valeur unique des paramètres β et α , afin de bien identifier et de classer sans ambiguïté les systèmes à masses spatialement dépendantes. Ces paramètres sont-ils universels ? Dépendent-ils de la nature du matériau étudié ? De la forme de la masse et du potentiel ? De leurs variations continues ou discontinues ? Peuvent-ils être expérimentalement identifiés ? Ou à travers les principes de base de la mécanique quantique ? Beaucoup d'études se sont penchées sur ce problème du choix paramètres β et α .

Notre objectif principal dans ce mémoire, porte sur l'enrichissement de la base des potentiels et masses spatialement variables exactement solvables par l'équation de Schrödinger généralisée pour des systèmes à masse dépendant de la position, et donner un outil d'analyse de phénomène de transport dans les hétérostructures semiconductrices.

Ce mémoire est structuré comme suit :

On va d'abord rappeler, au premier chapitre nous passons en revue différents travaux remarquables qui ont porté ces dernières années sur des systèmes quantiques à masses dépendant de la position. Nous y mettons en lumière leurs principales conclusions quant à la compréhension des nouveaux phénomènes physiques liés à la variabilité spatiale de la masse effective.

Dans le deuxième chapitre, nous abordons la résolution analytique de l'équation de Schrödinger généralisée pour des systèmes unidimensionnels et l'on a déduit les coefficients de transmission et de réflexion. Et en réétudiant les cas d'une marche abrupte et d'une barrière rectangulaire en potentiel et en masse, nous confirmerons les résultats obtenus par Lévy-Leblond [41].

Le troisième chapitre est consacré à l'illustration et 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. Pour chacun de ces cas les courbes sont présentées pour trois différents rapports des masses m_1 et m_2 des régions séparées par des hétérojonctions.

À la fin une conclusion générale est présentée dans le dernier chapitre.

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

I.1. HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

I.1.1. INTRODUCTION :

Beaucoup de recherches ont traité le sujet de l'hamiltonien effectif généralisé à des systèmes à masses effectives dépendant de la position. Ces recherches ont des conséquences directes dans différents domaines (physique nucléaire, physique de la matière condensée, physique des semi-conducteurs ...).

Dans ce présent chapitre nous présentons une collection de résumés d'articles de fonds qui traitent de systèmes quantiques à masses dépendant de la position. Il est remarquable qu'à l'exception des articles que l'on résumera dans ce qui suit et d'autres cités en référence, aucun ouvrage propre à ce domaine n'a été écrit jusqu'à présent.

Ce chapitre contient deux axes, le premier est consacré à une revue historique sur l'étude de l'hamiltonien effectif généralisé, et sur le meilleur choix de la valeur du paramètre d'ambiguïté β , ainsi que les contributions les plus importantes qui ont conduit à la compréhension et l'adoption de l'idée des systèmes à masses dépendant de la position. Le second on va déduire l'équation de Schrödinger par l'hamiltonien effectif généralisé pour un potentiel et la masse variable en fonction de la position.

Concernant l'aspect conceptuel de l'adoption de systèmes à masses dépendant de la position, notre choix s'est porté sur les travaux précurseurs et fondamentaux de Ludwig Von Roos [31], et Jean-Marc Lévy-Leblond [37].

I.1.2. Apport de Von Roos (1982) [31] :

Dans cet article [31], Von Roos a considéré que le mouvement des porteurs libres (des électrons et des trous) dans les semi-conducteurs de composition chimique non uniforme et aussi a déterminé l'hamiltonien avec une masse efficace dépendant de la position. Dans des travaux précédents il a montré que les masses dépendant de la position mènent à des contradictions et ce à cause du théorème de Bargmann, qui postule qu'une superposition cohérente d'états de masses différentes (paquets d'ondes)

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

est interdite. Il propose une extension du théorème de Bargmann mais qui mène à un hamiltonien avec masses dépendant de la position ne vérifiant plus l'invariance galiléenne. Il montre aussi que la dérivation usuelle de l'hamiltonien avec masse efficace dépendant de la position est nullement unique. Il existe en général, beaucoup de hamiltoniens inégaux issus de la même approximation, tous dérivés de beaucoup de forme d'hamiltoniens de base. Le théorème de Wannier-Slater valide pour les semi-conducteurs homogènes avec une composition chimique uniforme peut s'avérer être un point de départ normal pour une extension et une généralisation aux matériaux non uniformes, il suppose une masse scalaire dépendante de la position $m(r)$ et propose la forme suivante de l'opérateur énergie cinétique :

$$T = -\hbar^2/4(m(z)^\alpha \nabla m(z)^\beta \nabla m(z)^\gamma + m(z)^\gamma \nabla m(z)^\beta \nabla m(z)^\alpha)$$

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

L'opérateur de Gora et William [32] est obtenu pour $\alpha = -1$ et $\beta = \gamma = 0$, alors que celui de Zhu et Kroemer [34] pour $\alpha = \gamma = -1/2$ et $\beta = 0$. Pour le cas $\alpha = \gamma = 0$ et $\beta = -1$ on abouti à un troisième opérateur très usité.

Mais d'autre cas [39], Von Roos considère un semi-conducteur composé Possédant une composition chimique ayant une masse variant lentement dépendant de la position. Il trouve 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 prouvé 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.

L1.3. Contribution de Jean-Marc Lévy-Leblond (1995) [37] :

Jean-Marc Lévy-Leblond dans Les article [37], 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.

L'invariance galiléenne instantanée est employée pour dériver à partir des principes

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

premiers de la formulation hamiltonienne, l'expression de l'opérateur énergie cinétique d'un électron ayant une masse efficace dépendante de la position. Et par conséquent les conditions de raccordement de la fonction d'onde à travers des hétérojonctions abruptes.

L'étude d'hétérostructures de semi-conducteurs (et, plus généralement, de cristaux non homogènes) a donné lieu, dernièrement, à une discussion approfondie sur l'utilisation de modèles avec masse effectives simples (liées aux approximations de fonction d'enveloppe) pour la dynamique des électrons dans de tels systèmes. Les principales conclusions de son étude sont :

- a) Les conditions de continuité normales sur les interfaces abruptes, à savoir la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée doivent être remplacées par la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée divisée par la fonction masse $m(x)$.
- b) Comment généraliser la forme de l'opérateur cinétique afin de le rendre hermitique pour le cas d'une masse dépendante de la position, sachant que l'opérateur masse m ne commute plus avec l'opérateur impulsion p .
- c) L'application du concept PDM, en tant qu'idée dans la théorie quantique non relativiste est intimement liée à la notion d'invariance galiléenne dans la théorie de la particule libre, qui ne permet pas l'utilisation d'une masse effective non constante dans la structure d'un cristal non homogène.

Se basant sur la notion d'invariance galiléenne il a abouti à la conclusion que :

- a) Les conditions de raccordement aux interfaces doivent être la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée divisée par la masse.
- b) L'opérateur énergie cinétique correct doit être sous la forme :

$$T = p[1/2m(x)]p$$

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

- c) L'idée de l'utilisation d'une masse dépendante de la position est non seulement intéressante mais elle est aussi consistante.

I.1.4. Apport de L.Dekar et L.Chetouani et T.F.Hammann (1999) [38] :

Dans leurs article sous le titre: « Wave function for smooth potential and mass step » [38] il ont proposé la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle, pour L 'hamiltonien effective généralisé,

$$H_{gen} = -1/4(m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + V$$

Où $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

Pour des systèmes à marches douces en potentiel et en masse, la fonction d'onde dépend de la fonction de Heun. En étudiant le passage à la limite où les marches douces tendent vers des marches abruptes ils arrivent à la conclusion que les paramètres d'ambiguïté doivent prendre les valeurs $\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$. ce qui suggère que la forme appropriée pour l'hamiltonien pour une masse effective abrupte devrait avoir la forme $H_{abrupt} = 1/2 (p m^{-1} p) + V$. Cette forme implique que les conditions de raccordement à travers une interface abrupte doivent être la continuité de $\Psi(x)$ et de $[m(x)]^{-1} d(\Psi(x))/dx$.

I.1.5. Dutra et Almeida (2000)

Dans l'article [40] dénommé "**Solvabilité exacte des potentiels avec masse effective dépendant de la position**", Dutra et Almeida ont effectué un essai de fiabilité sur l'ordre des paramètres disponibles dans la littérature. Ils ont employé un modèle exactement soluble (potentiel de Morse) et ont conclu que l'ordre de Gora et de Williams [32] ($\alpha = \beta = \gamma = 0, \alpha = -1$) et Ben Daniel et Duke [33] ($\alpha = \alpha = \gamma = 0, \beta = -1$) devrait être rejetés pour le fait qu'ils mènent à des énergies complexes et donc non physiques. Cependant, ils ont classifié l'ordre de Zhu et de Kroemer [34] ($\alpha = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}, \beta = 0$), et celui de Li et de Kuhn [35] ($\alpha = \alpha = 0, \beta = \gamma = -1/2$) comme étant corrects. En conséquence, ils suggèrent que les

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

conditions de continuité aux frontières de l'hétérojonction obtenue par Zhu et Kroemer [34] sont les plus fiables.

I.1.6. Apport Mustafa et Mazharimousavi (2007) :

Ces auteurs [36] ont utilisé la notion d'opérateur pseudo - moment pour aboutir à la Conclusion que le " bon ordre fiable " est le choix $(\beta = -\frac{1}{2}, \alpha = \gamma = -1/4)$.

I.2. L'EQUATION DE SCHRÖDINGER GENERALISEE

L'équation de Schrödinger avec une masse non constante 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 de semi-conducteurs. L'intérêt croissant porté à ce domaine est dû au développement impressionnant des technologies sophistiquées de croissance de semiconducteur, comme l'épitaxie par jet moléculaire. Le mouvement des électrons dans les semiconducteurs est souvent décrit par l'équation de Schrödinger avec une masse dépendent de la position.

I.2.1. preuve l'équation de Schrödinger avec une masse variable :

l'équation de Schrödinger déduite de l'hamiltonien effectif généralisé $\frac{1}{4}(m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha)$ avec $\alpha + \beta + \gamma = -1$, pour un système à potentiel et à masse continûment variables, à savoir une marche douce en potentiel et en masse[14]

l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\mathbf{H} \Psi(x) = \mathbf{E} \Psi(x) \quad (\text{I.1})$$

Où H est Hamiltonien généralisé avec la masse variable :

$$H = \frac{1}{4} \left(m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\gamma(x) + m^\gamma(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x) \right) + v(x) \quad (\text{I.2})$$

Où $\alpha + \beta + \gamma$ est un paramètres d'ambiguïté

Et x est un position

CHAPITRE I : HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

$v(x)$: potentiel

$\Psi(x)$: fonction d'onde

Pour p est l'impulsion : $\vec{p} = m\vec{v}$

$$\text{On a} \quad \hat{p} = -i\hbar \overline{\text{grad}} \quad (\text{I.3})$$

$$\text{Donc} \quad \widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (\text{I.4})$$

On remplace \widehat{p}_x et H dans (I.1) il vient :

$$-\frac{\hbar^2}{4} m^\alpha(x) \frac{d}{dx} \left\{ m^\beta(x) \frac{d}{dx} [m^\gamma(x) \Psi(x)] \right\} - \frac{\hbar^2}{4} m^\gamma(x) \frac{d}{dx} \left\{ m^\beta(x) \frac{d}{dx} [m^\alpha(x) \Psi(x)] \right\} + [v(x) - E] \Psi(x) = 0 \quad (\text{I.5})$$

On dérivée $\frac{d}{dx} [m^\gamma(x) \Psi(x)]$ et $\frac{d}{dx} [m^\alpha(x) \Psi(x)]$ dans l'équation (I.5) on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{4} m^\alpha(x) \frac{d}{dx} \left\{ m^\beta(x) \left[\gamma m^{\gamma-1}(x) m'(x) \Psi(x) + m^\gamma(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \right\} - \frac{\hbar^2}{4} \times m^\gamma(x) \frac{d}{dx} \left\{ m^\beta(x) \left[\alpha m^{\alpha-1}(x) m'(x) \Psi(x) + m^\alpha(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \right\} + [v(x) - E] \Psi(x) = 0 \quad (\text{I.6})$$

$$\text{Avec :} \quad m'(x) = \frac{dm(x)}{dx} \quad \text{et} \quad m''(x) = \frac{d^2m(x)}{dx^2} \quad (\text{I.7})$$

Donc :

$$-\frac{\hbar^2}{4} m^\alpha(x) \frac{d}{dx} \left\{ \left[\gamma m^{\beta+\gamma-1}(x) m'(x) \Psi(x) + m^{\beta+\gamma}(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \right\} - \frac{\hbar^2}{4} \times m^\gamma(x) \frac{d}{dx} \left\{ \left[\alpha m^{\beta+\alpha-1}(x) m'(x) \Psi(x) + m^{\beta+\alpha}(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \right\} + [v(x) - E] \Psi(x) = 0 \quad (\text{I.8})$$

CHAPITRE I :HAMILTONIEN EFFECTIF GENERALISE

$$\begin{aligned}
 &-\frac{\hbar^2}{4}m^\alpha(x) \left\{ \left(\gamma(\beta + \gamma - 1)m^{\beta+\gamma-2}(x)m'^2(x)\Psi(x) \right) + \left(\gamma m^{\beta+\gamma-1}(x)m''(x)\Psi(x) \right) + \right. \\
 &\left. \left(\gamma m^{\beta+\gamma-1}(x)m'(x)\frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + \left((\beta + \gamma)m^{\beta+\gamma-1}(x)m'(x)\frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + \left(m^{\beta+\gamma}(x)\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right) \right\} - \\
 &\frac{\hbar^2}{4}m^\gamma(x) \left\{ \left(\alpha(\beta + \alpha - 1)m^{\beta+\alpha-2}(x)m'^2(x)\Psi(x) \right) + \left(\alpha m^{\beta+\alpha-1}(x)m''(x)\Psi(x) \right) + \right. \\
 &\left. \left(\alpha m^{\beta+\alpha-1}(x)m'(x)\frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + \left((\beta + \alpha)m^{\beta+\alpha-1}(x)m'(x)\frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + \left(m^{\beta+\alpha}(x)\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right) \right\} + \\
 &[v(x) - E]\Psi(x) = 0
 \end{aligned} \tag{I.9}$$

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

Donc l'équation (I.9) s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 &-\frac{\hbar^2}{4} \left\{ \gamma(\beta + \gamma - 1)\frac{m'^2(x)}{m^3(x)}\Psi(x) + \gamma\frac{m''(x)}{m^2(x)}\Psi(x) + \gamma\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\Psi(x)}{dx} + (\beta + \gamma)\frac{m'(x)}{m^2(x)} + \right. \\
 &\left. \frac{1}{m(x)}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \alpha(\beta + \alpha - 1)\frac{m'^2(x)}{m^3(x)}\Psi(x) + \alpha\frac{m''(x)}{m^2(x)}\Psi(x) + \alpha\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\Psi(x)}{dx} + \right. \\
 &\left. (\beta + \alpha)\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\Psi(x)}{dx} + \frac{1}{m(x)}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right\} + [v(x) - E]\Psi(x) = 0
 \end{aligned} \tag{I.10}$$

Donc l'équation de Schrödinger généralisé indépendante du temps s'écrit également sous la forme :

$$\begin{aligned}
 &\left[-\frac{1}{2m(x)}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)}\frac{d\Psi(x)}{dx} + (v(x) - E)\Psi(x) \right] + [(1 + \beta)m(x)m''(x) - \\
 &2(\beta + 1 + \alpha(\alpha + \beta + 1)m'^2(x))]\frac{\Psi(x)}{4m^3(x)} = 0
 \end{aligned} \tag{I.11}$$

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

II.1. INTRODUCTION :

dans un chapitre ,Lévy-Leblond [41]a déjà utilisé cette dernière forme du hamiltonien ainsi que ces mêmes condition de continuité pour résoudre l'équation de Schrödinger pour des systèmes unidimensionnels à masses et à potentiel continus par morceaux, à savoir ceux d'une marche, d'une barrière rectangulaire. et avec nous avons le travail des calculs analytique **les coefficients de transmission** et les fonctions d'ondes ,ce qui implique que **les condition de continuité** à travers une marche de potentiel et une barrière rectangulaire doivent être la continuité de la fonction d'onde et de la fonction d'onde divisée par la masse.

II.2. RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER GENERALISEE POUR UNE MARCHE EN POTENTIEL ET EN MASSE :

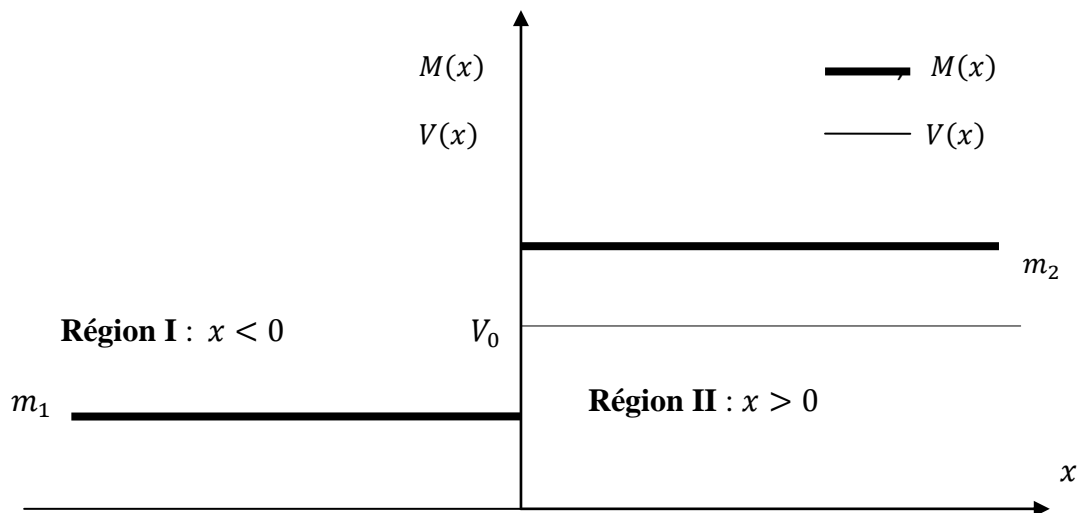


Figure (01)

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

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

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

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

L'hamiltonien du système à une masse dépendante de la position :

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\gamma(x) + m^\gamma(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x)) + v(x) \quad (\text{II.12})$$

Là où $m = M(x)$ et $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, avec la contrainte:

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

l'équation de Schrödinger généralisé avec la masse dépend de la position [14] :

$$\left[-\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} + (v(x) - E)\Psi(x) \right] + [(1 + \beta)m(x)m''(x) - 2(\beta + 1 + \alpha(\alpha + \beta + 1)m'(x))] \frac{\Psi(x)}{4m^3(x)} = 0 \quad (\text{II.13})$$

La résolution de l'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 puis raccorder les solutions en $x = 0$ en utilisant des conditions de continuité.

II.2.1. Solution dans la région I

a - $x < 0$:

Dans le cas $E < V_0$

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

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

Nous avons le même calcul pour trouver **le coefficient de transmission** dans le cas $E > V_0$. Pour le cas unidimensionnel, par exemple dans la direction de l'axe x , l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut-être écrite comme:

$$H \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (\text{II.14})$$

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

$$\frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \Psi_1(x) = 0 \quad (\text{II.15})$$

Et avec $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$, On a supposé que la particule provient de la gauche donc

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

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

$$\Psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (\text{II.16})$$

Où A_1 et A_1' sont des constantes d'intégration

On va expliquer le terme en $e^{ik_1 x}$ correspond à une onde se propageant dans le sens des x croissants tandis que le terme en $e^{-ik_1 x}$ correspond à une onde se propageant dans le sens des x décroissants.

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

II.2.2. Solution dans la région II

b- $x > 0$

avec même le cas $E > V_0$

dans **la région II**, l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\frac{d^2 \Psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{II.17})$$

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

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

$$\Psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad (\text{II.18})$$

Où A_2 et A_2' sont des constantes d'intégration

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

Donc la solution dans **Le région II** s'écrit :

$$\Psi_{II}(x) = c e^{ik_2 x} \quad (\text{II.19})$$

II.2.3. Conditions de continuité :

Dans le choix de **Lévy-Leblond** la fonction d'onde Ψ est continue et la dérivée de la fonction d'onde sur la masse $\frac{\Psi}{m}$ est continue

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

Les conditions aux limites vont nous permettre de déterminer les trois constantes, ou au moins des relations entre elles.

Les conditions de continuité en $x = 0$ est :

La continuité de la fonction en $x = 0$ est :

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad \Rightarrow \quad A_1 + A'_1 = A_2 \quad (\text{II.20})$$

La continuité de la dérivée de la fonction en $x = 0$ sur la masse est :

$$\frac{1}{m_1} \Psi'_1(0) = \frac{1}{m_2} \Psi'_2(0) \quad \Rightarrow \quad \frac{ik_1}{m_1} (A_1 - A'_1) = \frac{ik_2}{m_2} A_2 \quad \Rightarrow \quad \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} (A_1 - A'_1) = A_2 \quad (\text{II.21})$$

En utilisant la collection de l'équation (II.20) et (II.21)

Donnent le A'_1 et A_2 en fonction de A_1 ; on trouve ainsi :

$$\begin{cases} A'_1 = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_2 k_1 + m_1 k_2} A_1 \\ A_2 = \frac{2m_2 k_1}{m_2 k_1 + m_1 k_2} A_1 \end{cases} \quad (\text{II.22})$$

Posons :

$$v_1 = \frac{k_1}{m_1} = \left[\frac{2E}{m_1 \hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.23})$$

$$v_2 = \frac{k_2}{m_2} = \left[\frac{2(E-V_0)}{m_2 \hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.24})$$

On remplace v_1 et v_2 dans relation (II.22) ; on trouve ainsi :

$$\begin{cases} A'_1 = \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} A_1 \\ A_2 = \frac{2v_1 v_2}{v_1 + v_2} A_1 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \frac{A'_1}{A_1} = \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \\ \frac{A_2}{A_1} = \frac{2v_1 v_2}{v_1 + v_2} \end{cases} \quad (\text{II.25})$$

Dans ce cas nous avons trois constantes inconnus et deux équations.

II.2.4. Coefficient de transmission et de réflexion :

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

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

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

On a défini de la densité de courant de probabilité par :

$$\vec{j} = \rho \vec{V} = \Psi^*(x) \frac{\vec{p}}{M(x)} \Psi(x) \quad (\text{II.26})$$

$$\text{Particule incidente : } j_i = \frac{\hbar k_1}{m_1} A_1 A_1^* \Rightarrow j_i = \frac{\hbar k_1}{m_1} |A_1|^2 \Rightarrow j_i = \hbar v_1 |A_1|^2 \quad (\text{II.27})$$

$$\text{Particule réflexion : } j_r = -\frac{\hbar k_1}{m_1} A_1 A_1^* \left(\frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_2 k_1 + m_1 k_2} \right)^2 \Rightarrow j_r = -\frac{\hbar k_1}{m_1} |A_1'|^2 \Rightarrow j_r = -\hbar v_1 |A_1'|^2 \quad (\text{II.28})$$

$$\text{Particule transmise : } j_t = \frac{\hbar k_2}{m_2} A_1 A_1^* \left(\frac{2m_2 k_1}{m_2 k_1 + m_1 k_2} \right)^2 \Rightarrow j_t = \frac{\hbar k_2}{m_2} |A_2|^2 \Rightarrow j_t = \hbar v_2 |A_2|^2 \quad (\text{II.29})$$

Les coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement donnée par $j_i = |j_r| + j_t \Rightarrow T + R = 1$, d'après le principe de conservation de densité du courant de probabilité

Les coefficients de réflexion :

$$R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right| = \frac{\hbar v_1 |A_1'|^2}{\hbar v_1 |A_1|^2} = \left(\frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_2 k_1 + m_1 k_2} \right)^2 \quad (\text{II.30})$$

Posons $v_1 = \frac{k_1}{m_1}$ et $v_2 = \frac{k_2}{m_2}$ et remplacent dans R on obtient :

$$R = \left(\frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \right)^2 \quad (\text{II.31})$$

On remplace (II.23) et (II.24) dans R on trouve :

$$R = \frac{\left[\left(\frac{2E}{m_1 \hbar^2} - \frac{2(E-V_0)}{m_2 \hbar^2} \right)^{1/2} \right]^2}{\left[\left(\frac{2E}{m_1 \hbar^2} + \frac{2(E-V_0)}{m_2 \hbar^2} \right)^{1/2} \right]^2} = \frac{E(m_2 - m_1) + m_1 V_0}{E(m_2 + m_1) - m_1 V_0} \quad (\text{II.32})$$

Les coefficients de transmission :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

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

$$\Rightarrow T = \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2} \quad (\text{II.33})$$

On remplace (II.23) et (II.24) dans T :

$$T = \frac{4[2m_2 E \times 2m_1 (E - V_0)]^{1/2}}{[2m_2 E + 2m_1 (E - V_0)]^{1/2}} \quad (\text{II.34})$$

Donc finalement

$$T = \frac{4 \sqrt{\frac{m_1}{m_2} \left[\frac{E}{V_0} \times \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right) \right]^{1/2}}}{\sqrt{\frac{m_1}{m_2} \left[\frac{E}{V_0} + \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right) \right]^{1/2}}} \quad (\text{II.35})$$

Le coefficient de transmission ne tend pas vers l'unité quand l'énergie tend vers l'infini, mais tend vers la valeur limite

$$\lim_{E \rightarrow \infty} T = \lim_{E \rightarrow \infty} \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2} \Rightarrow T_1 = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2} \quad (T \rightarrow T_1 \text{ comme } E \rightarrow \infty) ,$$

Où m_1 et m_2 représentent respectivement les valeurs de la masse en dehors et sur la barrière de potentiel.

Quand $m_1 > m_2$, **le coefficient de transmission** est égal à l'unité pour la valeur spécifique de l'énergie E_t

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2} = 1 \Rightarrow E_t = \frac{m_1}{m_1 - m_2} V_0 \quad (T = 1 \text{ pour } E = E_t) ,$$

Où V_0 représente la hauteur de la barrière de Potentiel .

II.3. 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 :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

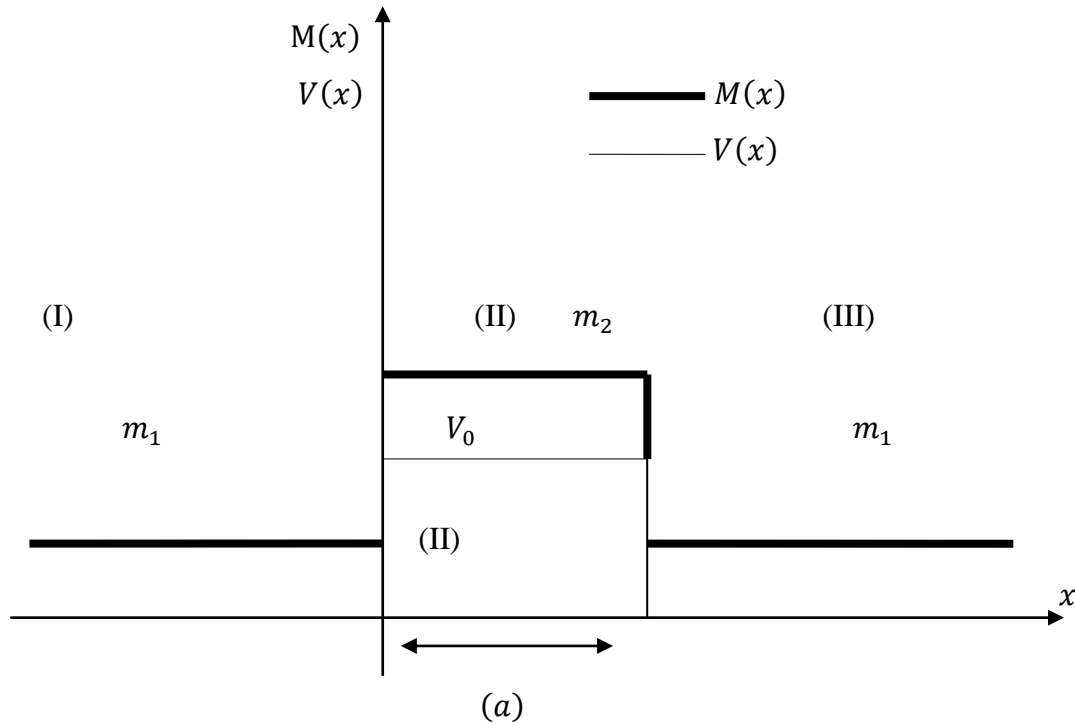


Figure (02)

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

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

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

L'hamiltonien du système à une masse dépendante de la position :

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\gamma(x) + m^\gamma(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x)) + v(x) \quad (\text{II.36})$$

Là où $m = M(x)$ et $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, avec la contrainte:

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

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

l'équation de Schrödinger généralisé avec la masse dépendent de la position [14] :

$$\left[-\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} + (v(x) - E)\Psi(x) \right] + [(1 + \beta)m(x)m''(x) - 2(\beta + 1 + \alpha(\alpha + \beta + 1)m'(x))] \frac{\Psi(x)}{4m^3(x)} = 0 \quad (\text{II.37})$$

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

II.3.1. Solution dans la région I :

On s'intéresse à le cas $E > V_0$

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

$$\mathbf{H} \Psi(x) = \mathbf{E} \Psi(x) \quad (\text{II.38})$$

Equation aux valeurs propres dans **la région I** est :

$$\frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \Psi_1(x) = 0 \quad (\text{II.39})$$

Et avec $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$

Donc la solution générique dans **la région I** de la fonction d'onde indépendante du temps prend la forme :

$$\Psi_1(x) = B_1 e^{ik_1 x} + B'_1 e^{-ik_1 x} \quad (\text{II.40})$$

II.3.2. Solution dans la région II :

Equation Dans **la région II** s'écrit :

$$\frac{d^2 \Psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{II.41})$$

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

Donc la solution générique dans **la région II** s'écrit :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$\Psi_{II}(x) = B_2 e^{ik_2x} + B_2' e^{-ik_2x} \quad (II.42)$$

II.3.3. Solution dans la région III :

Equation Dans la région III s'écrit :

$$\frac{d^2 \Psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \Psi_{III}(x) = 0 \quad (II.43)$$

Et avec $k_1^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2}$

Donc la solution générique dans la région III de la fonction d'onde indépendante du temps prend la forme :

$$\Psi_{III}(x) = B_3 e^{ik_1x} + B_3' e^{-ik_1x} \quad (II.44)$$

Prenons, $B_3' = 0$ (particule incidente venant de $x = -\infty$) . donc :

$$\Psi_{III}(x) = B_3 e^{ik_1x} \quad (II.45)$$

II.3.4. Conditions de continuité :

Selon le choix **Lévy-Leblond** la fonction d'onde Ψ est continue et la dérivée de la fonction d'onde sur la masse $\frac{\Psi}{m}$ est continue, Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée

II.3.4.1. Raccord des régions I et II :

Les conditions de continuité en $x=0$

La continuité de la fonction en $x=0$ est :

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Rightarrow B_1 + B_1' = B_2 + B_2' \quad (II.46)$$

La continuité de la dérivée de la fonction en $x=0$ sur la masse est :

$$\frac{1}{m_1} \Psi_1'(0) = \frac{1}{m_2} \Psi_2'(0) \Rightarrow \frac{k_1}{m_1} (B_1 - B_1') = \frac{k_2}{m_2} (B_2 - B_2') \quad (II.47)$$

Donc on va décrire la relation (II.46) et (II.47) sous forme :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$B_1 + B'_1 = B_2 + B'_2 \quad (\text{II.48})$$

Et
$$B_1 - B'_1 = \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} (B_2 - B'_2) \quad (\text{II.49})$$

II.3.4.2. Raccord des régions II et III :

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

$$\Psi_{\text{II}}(a) = \Psi_{\text{III}}(a) \Rightarrow B_2 e^{ik_2 a} + B'_2 e^{-ik_2 a} = B_3 e^{ik_1 a} \quad (\text{II.50})$$

La Continuité de la dérivée de fonction sur la masse en $x=a$:

$$\frac{1}{m_2} \Psi'_{\text{II}}(a) = \frac{1}{m_1} \Psi'_{\text{III}}(a) \Rightarrow (B_2 e^{ik_2 a} - B'_2 e^{-ik_2 a}) = \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} B_3 e^{ik_1 a} \quad (\text{II.51})$$

Donc

$$B_2 e^{ik_2 a} + B'_2 e^{-ik_2 a} = B_3 e^{ik_1 a} \quad (\text{II.52})$$

$$(B_2 e^{ik_2 a} - B'_2 e^{-ik_2 a}) = \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} B_3 e^{ik_1 a} \quad (\text{II.53})$$

En additionnant (II.52) à (II.53) nous avons eu la relation (II.54) :

$$B_2 = \left(\frac{m_1 k_2 + m_2 k_1}{2m_1 k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} B_3 \quad (\text{II.54})$$

et nous avons eu l'équation (II.55) de la soustraction de (II.52) de (II.53) :

$$B'_2 = \left(\frac{m_1 k_2 - m_2 k_1}{2m_1 k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} B_3 \quad (\text{II.55})$$

En additionnant (II.48) à (II.49) et remplacez (II.54) et (II.55) nous avons eu la relation (II.56) :

$$B_1 = \left(\frac{m_2 k_1 + m_1 k_2}{2m_2 k_1} \right) \left(\frac{m_1 k_2 + m_2 k_1}{2m_1 k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)a} B_3 + \left(\frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{2m_2 k_1} \right) \left(\frac{m_1 k_2 - m_2 k_1}{2m_1 k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)a} B_3 \quad (\text{II.56})$$

Après la simplification nous obtenons la relation (II.57) :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$B_1 =$

$$\left[\frac{1}{4} \left(\frac{(m_2 k_1 + m_1 k_2)^2}{(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \right) \cos k_2 a - i \frac{1}{4} \left(\frac{(m_1 k_2 + m_2 k_1)^2}{(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \right) \sin k_2 a - \frac{1}{4} \left(\frac{(m_2 k_1 - m_1 k_2)^2}{(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \right) \cos k_2 a - i \frac{1}{4} \left(\frac{(m_2 k_1 - m_1 k_2)^2}{(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \right) \sin k_2 a \right] B_3 e^{ik_1 a}$$

Donc $B_1 = \left[\cos k_2 a - i \frac{(m_2 k_1)^2 + (m_1 k_2)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a \right] B_3 e^{ik_1 a}$ (II.57)

Alors

$$B_1' = \left[i \frac{(m_1 k_2)^2 - (m_2 k_1)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a \right] B_3 e^{ik_1 a}$$
 (II.58)

Ce qui nous mène au résultat suivant :

$$B_3 = \frac{1}{\left[\cos k_2 a - i \frac{(m_2 k_1)^2 + (m_1 k_2)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a \right] e^{ik_1 a}} B_1$$
 (II.59)

II.3.5. Coefficient de transmission et de réflexion :

la densité de courant de probabilité :

$$\vec{j} = \rho \vec{V} = \Psi^*(x) \frac{\vec{p}}{M(x)} \Psi(x)$$
 (II.60)

Particule incidente : $j_i = \frac{\hbar k_1}{m_1} |B_1|^2 = \hbar v_1 |B_1|^2$ (II.61)

Particule réflexion : $j_r = -\frac{\hbar k_1}{m_1} |B_2|^2 = -\hbar v_1 |B_2|^2$ (II.62)

Particule transmise : $j_t = \frac{\hbar k_2}{m_2} |B_3|^2 = \hbar v_2 |B_3|^2$ (II.63)

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

$$R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right| = \frac{\hbar v_1 |B_2|^2}{\hbar v_1 |B_1|^2} = \left| \frac{\frac{(m_1 k_2)^2 - (m_2 k_1)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a}{\cos k_2 a - i \frac{(m_2 k_1)^2 + (m_1 k_2)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a} \right|^2$$

$$\Rightarrow R = \frac{((m_2 k_1)^2 - (m_1 k_2)^2)^2 \sin^2(k_2 a)}{4(m_2 k_1)^2 (m_1 k_2)^2 + ((m_2 k_1)^2 - (m_1 k_2)^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$
 (II.64)

En replaçant (II.23) et (II.24) dans R, Que l'on peut écrire également sous la forme :

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$R = \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}{4(v_1 v_2)^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (\text{II.65})$$

On introduit le **coefficient de transmission T** de la barrière

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = \left| \frac{B_3}{B_1} \right|^2 \text{ car dans la région (I) et (III) du même vecteur d'onde}$$

$$\text{Ce qui conduit à : } T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = \left| \frac{B_3}{B_1} \right|^2 = \left| \frac{B_1}{B_1 \left[\cos k_2 a - i \frac{(m_2 k_1)^2 + (m_1 k_2)^2}{2(m_2 k_1)(m_1 k_2)} \sin k_2 a \right]} \right|^2$$

Donc on peut écrire également sous la forme :

$$\Rightarrow T = \frac{4(m_2 k_1)^2 (m_1 k_2)^2}{4(m_2 k_1)^2 (m_1 k_2)^2 + ((m_2 k_1)^2 - (m_1 k_2)^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (\text{II.66})$$

En replaçant (II.23) et (II.24) dans T on obtient :

$$\begin{aligned} T &= \frac{4(v_1 v_2)^2}{4(v_1 v_2)^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \\ \Rightarrow T &= \frac{1}{1 + \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2}{4(v_1 v_2)^2} \sin^2(k_2 a)} \end{aligned} \quad (\text{II.67})$$

$$\text{Donc : } T = [1 + g(E) \sin^2(k_2 a)]^{-1} \quad (\text{II.68})$$

$$\text{Avec } g(E) = \left(\frac{v_1^2 - v_2^2}{2v_1 v_2} \right)^2 = \frac{[(m_1 - m_2)E - m_1 V_0]^2}{4m_1 m_2 E(E - V_0)}$$

$$\text{Alors finalement } T = \left[1 + \frac{\left[\frac{(m_1 - 1)E}{m_2 V_0} - \frac{m_1}{m_2} \right]^2}{4 \frac{m_1 E}{m_2 V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)} \sin^2(k_2 a) \right]^{-1} \quad (\text{II.69})$$

$$\text{Avec } k_2^2 = \frac{2m_2(E - V_0)}{\hbar^2}, \text{ et } a = \pi \hbar (m_2 V_0)^{-1/2}$$

$$T = 1 \Rightarrow \frac{1}{1 + \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2}{4(v_1 v_2)^2} \sin^2(k_2 a)} = 1$$

On peut déduire:

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$(v_1^2 - v_2^2)^2 \sin^2(k_2 a) = 0 \Rightarrow \begin{cases} (v_1^2 - v_2^2)^2 = 0 \\ \text{ou} \\ \sin^2(k_2 a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} v_1^2 = v_2^2 \\ \text{ou} \\ k_2 = \frac{2\pi n}{a} \end{cases}$$

Alors $v_1^2 = v_2^2$ si $k_1 \simeq k_2$

C'est-à-dire : $m_1 = m_2$

Si $m_1 \neq m_2$

$$g(E) = \left(\frac{v_1^2 - v_2^2}{2v_1 v_2} \right)^2 = \frac{[(m_1 - m_2)E - m_1 V_0]^2}{4m_1 m_2 E(E - V_0)}$$

Le coefficient de transmission ne tend pas lui aussi vers l'unité quand l'énergie tend vers l'infini, mais oscille indéfiniment entre l'unité et la valeur T_l

$$T_l = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}$$

II.4. Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse :

On considère le problème de la transmission d'une particule à travers une double barrière en potentiel et en masse rectangulaire :

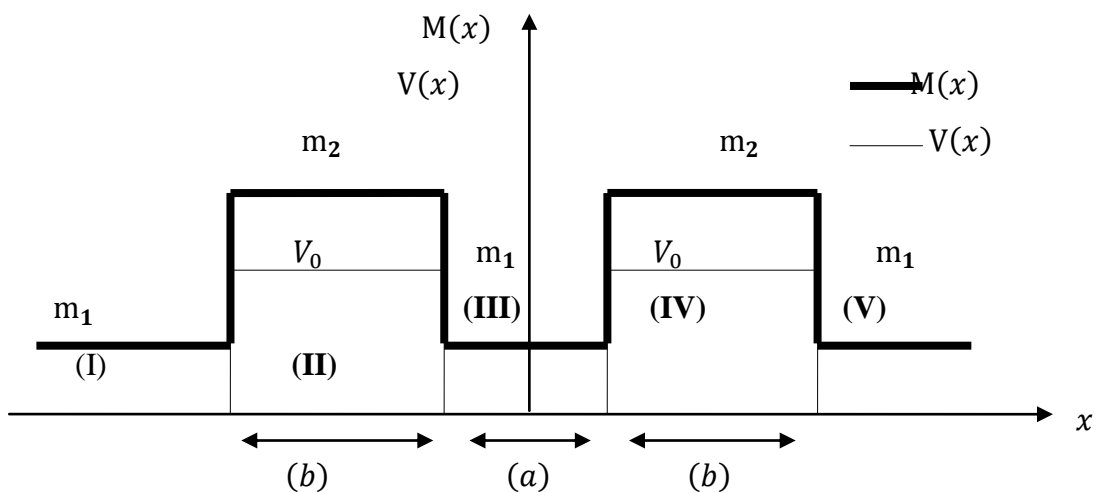


Figure (03)

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

Le potentiel et la masse s'expriment en fonction des cinq régions I à V par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -d, x > d, -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0 & -(d-h) < x < -(\frac{a}{2}+h), (\frac{a}{2}+h) < x < (d-h) \\ \frac{V_0}{h}(x+d) & -d < x < -(d-h) \\ -\frac{V_0}{h}(x+\frac{a}{2}) & -(\frac{a}{2}+h) < x < -\frac{a}{2} \\ \frac{V_0}{h}(x-\frac{a}{2}) & \frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}+h \\ -\frac{V_0}{h}(x-d) & (d-h) < x < d \end{cases}$$

$$M(x) = \begin{cases} m_1 & -(\frac{a}{2}+h) < x < (\frac{a}{2}+h), x < -(d-h), x > (d-h) \\ m_2 & -(d-h) < x < -(h+\frac{a}{2}), (h+\frac{a}{2}) < x < (d-h) \end{cases}$$

L'hamiltonien du système à une masse dépendante de la position :

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\gamma(x) + m^\gamma(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x)) + v(x) \quad (\text{II.70})$$

Là où $m = M(x)$ et $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, avec la contrainte:

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

l'équation de Schrödinger généralisé avec la masse dépendent de la position [14] s'écrite :

$$\left[-\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} + (v(x) - E)\Psi(x) \right] + [(1 + \beta)m(x)m''(x) - 2(\beta + 1 + \alpha(\alpha + \beta + 1)m'^2(x))] \frac{\Psi(x)}{4m^3(x)} = 0 \quad (\text{II.71})$$

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**.

II.4.1. Solution dans la région I :

Dans le cas où $E > V_0$ l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut-être écrite comme:

$$H \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (\text{II.72})$$

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE ET DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$\text{Et donc } \Psi''(x) + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Psi(x) = 0 \quad (\text{II.73})$$

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

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2} \Psi_1(x) = 0 \quad (\text{II.74})$$

$$\text{Et avec } k_1^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2}$$

Sa solution dans la **région I** s'écrit:

$$\Psi_1(x) = C_1 e^{ik_1x} + C_1' e^{-ik_1x} \quad (\text{II.75})$$

II.4.2. Solution dans la région II :

Dans la **région II** :

$$\frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{II.76})$$

La solution dans la **région II** s'écrit:

$$\Psi_{II}(x) = C_2 e^{ik_2x} + C_2' e^{-ik_2x} \quad (\text{II.77})$$

II.4.3. Solution dans la région III :

L'équation aux valeurs propres dans la **région III**:

$$\frac{d^2\Psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2} \Psi_{III}(x) = 0 \quad (\text{II.78})$$

La solution est de la forme:

$$\Psi_{III}(x) = C_3 e^{ik_1x} + C_3' e^{-ik_1x} \quad (\text{II.79})$$

II.4.4. Solution dans la région (IV) :

L'équation aux valeurs propres dans la **région (IV)**

$$\frac{d^2\Psi_{(IV)}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2(E-V_0)}{\hbar^2} \Psi_{(IV)}(x) = 0 \quad (\text{II.80})$$

La solution dans la **région (IV)** s'écrit:

$$\Psi_{(IV)}(x) = C_4 e^{ik_2x} + C_4' e^{-ik_2x} \quad (\text{II.81})$$

II.4.5. Solution dans la région (V) :

L'équation aux valeurs propres dans la **région (V)** :

$$\frac{d^2\Psi_{(V)}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2} \Psi_{(V)}(x) = 0 \quad (\text{II.82})$$

La solution est de la forme:

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$\Psi_{(\bar{v})}(x) = C_5 e^{ik_1 x} + C'_5 e^{-ik_1 x} \quad (\text{II.83})$$

Prenons $C'_5 = 0$ (Particule incidente venant de $x = -\infty$).

Donc

$$\Psi_{(\bar{v})}(x) = C_5 e^{ik_1 x} \quad (\text{II.84})$$

II.4.6. Conditions de continuité :

les conditions de raccordement résultant du hamiltonien H sont la continuité de $m^\alpha \Psi$ et de $m^\beta [d(m^\alpha \Psi)/dx]$

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

II.4.6.1. Raccord des régions I et II :

Les **conditions de continuité** en $x = -\left(b + \frac{a}{2}\right)$:

La **continuité** de la fonction :

$$\begin{aligned} m_2^\alpha \Psi_{\text{II}} \left(-\left(b + \frac{a}{2}\right) \right) &= m_1^\alpha \Psi_{\text{I}} \left(-\left(b + \frac{a}{2}\right) \right) \Rightarrow \\ m_2^\alpha \left(C_2 e^{-ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} + C'_2 e^{ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) &= m_1^\alpha \left(C_1 e^{-ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} + C'_1 e^{ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) \end{aligned}$$

La **continuité** de la dérivée :

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha+\beta} \Psi'_{\text{II}} \left(-\left(b + \frac{a}{2}\right) \right) &= m_1^{\alpha+\beta} \Psi'_{\text{I}} \left(-\left(b + \frac{a}{2}\right) \right) \Rightarrow \\ m_2^{\alpha+\beta} (ik_2) \left(C_2 e^{-ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} - C'_2 e^{ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) &= m_1^{\alpha+\beta} (ik_1) \left(C_1 e^{-ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} - C'_1 e^{ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) \end{aligned}$$

Posons $\mu = \frac{m_2}{m_1}$

Alors :

$$C_1 e^{-ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} + C'_1 e^{ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} = \mu^\alpha \left(C_2 e^{-ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} + C'_2 e^{ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) \quad (\text{II.85})$$

Et

$$C_1 e^{-ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} - C'_1 e^{ik_1 \left(b + \frac{a}{2}\right)} = \mu^{\alpha+\beta} (k_2/k_1) \left(C_2 e^{-ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} - C'_2 e^{ik_2 \left(b + \frac{a}{2}\right)} \right) \quad (\text{II.86})$$

II.4.6.2. Raccord des régions II et III :

La **Continuité** de la fonction d'onde en $x = -a/2$:

$$\begin{aligned} m_2^\alpha \Psi_{\text{II}} \left(-\left(a/2\right) \right) &= m_1^\alpha \Psi_{\text{III}} \left(-\left(a/2\right) \right) \Rightarrow \\ m_2^\alpha \left(C_2 e^{-ik_2 \left(a/2\right)} + C'_2 e^{ik_2 \left(a/2\right)} \right) &= m_1^\alpha \left(C_3 e^{-ik_1 \left(a/2\right)} + C'_3 e^{ik_1 \left(a/2\right)} \right) \end{aligned}$$

La **continuité** de la dérivée:

$$m_2^{\alpha+\beta} \Psi'_{\text{II}} \left(-\left(a/2\right) \right) = m_1^{\alpha+\beta} \Psi'_{\text{III}} \left(-\left(a/2\right) \right) \Rightarrow$$

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_2e^{-ik_2(a/2)} - C_2'e^{ik_2(a/2)}) = m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_3e^{-ik_1(a/2)} - C_3'e^{ik_1(a/2)})$$

Alors :

$$C_3e^{-ik_1(a/2)} + C_3'e^{ik_1(a/2)} = \mu^\alpha(C_2e^{-ik_2(a/2)} + C_2'e^{ik_2(a/2)}) \quad (\text{II.87})$$

Et

$$C_3e^{-ik_1(a/2)} - C_3'e^{ik_1(a/2)} = \mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)(C_2e^{-ik_2(a/2)} - C_2'e^{ik_2(a/2)}) \quad (\text{II.88})$$

II.4.6.3. Raccord des régions III et (IV) :

La Continuité de la fonction d'onde en $x = a/2$:

$$\begin{aligned} m_1^\alpha \Psi_{\text{III}}(a/2) &= m_2^\alpha \Psi_{(\text{IV})}(a/2) \Rightarrow \\ m_1^\alpha (C_3e^{ik_1(a/2)} + C_3'e^{-ik_1(a/2)}) &= m_2^\alpha (C_4e^{ik_2(a/2)} + C_4'e^{-ik_2(a/2)}) \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée:

$$\begin{aligned} m_1^{\alpha+\beta} \Psi'_{\text{III}}(a/2) &= m_2^{\alpha+\beta} \Psi'_{(\text{IV})}(a/2) \Rightarrow \\ m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_3e^{ik_1(a/2)} - C_3'e^{-ik_1(a/2)}) &= m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_4e^{ik_2(a/2)} - C_4'e^{-ik_2(a/2)}) \end{aligned}$$

Alors :

$$C_3e^{ik_1(a/2)} + C_3'e^{-ik_1(a/2)} = \mu^\alpha(C_4e^{ik_2(a/2)} + C_4'e^{-ik_2(a/2)}) \quad (\text{II.89})$$

Et

$$C_3e^{ik_1(a/2)} - C_3'e^{-ik_1(a/2)} = \mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)(C_4e^{ik_2(a/2)} - C_4'e^{-ik_2(a/2)}) \quad (\text{II.90})$$

II.4.6.4. Raccord des régions (IV) et (V) :

Les conditions de continuité en $x = b + a/2$:

La continuité de la fonction :

$$\begin{aligned} m_2^\alpha \Psi_{(\text{IV})}(b + a/2) &= m_1^\alpha \Psi_{(\text{V})}(b + a/2) \Rightarrow \\ m_2^\alpha (C_4e^{ik_2(b+a/2)} - C_4'e^{-ik_2(b+a/2)}) &= m_1^\alpha (C_5e^{ik_1(b+a/2)} - C_5'e^{-ik_1(b+a/2)}) \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée:

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha+\beta} \Psi'_{(\text{IV})}(b + a/2) &= m_1^{\alpha+\beta} \Psi'_{(\text{V})}(b + a/2) \Rightarrow \\ m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_4e^{ik_2(b+a/2)} - C_4'e^{-ik_2(b+a/2)}) &= m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_5e^{ik_1(b+a/2)} - C_5'e^{-ik_1(b+a/2)}) \end{aligned}$$

Alors :

$$C_5e^{ik_1(b+a/2)} - C_5'e^{-ik_1(b+a/2)} = \mu^\alpha(C_4e^{ik_2(b+a/2)} - C_4'e^{-ik_2(b+a/2)}) \quad (\text{II.91})$$

Et

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$C_5 e^{ik_1(b+a/2)} = \mu^{\alpha+\beta} (k_2/k_1) (C_4 e^{ik_2(b+a/2)} - C_4' e^{-ik_2(b+a/2)}) \quad (\text{II.92})$$

II.4.7. Coefficient de transmission (T) et de réflexion(R) :

Les équations (II.91) et (II.92) donnent :

$$C_4 = \frac{\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1}}{2\mu^{\alpha+\beta} k_2/k_1} e^{i(k_1-k_2)(b+a/2)} C_5 \quad (\text{II.93})$$

Et

$$C_4' = \frac{\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1}}{2\mu^{\alpha+\beta} k_2/k_1} e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)} C_5 \quad (\text{II.94})$$

On pose :

$$C_4 = A_0 e^{i(k_1-k_2)(b+a/2)} C_5 \quad (\text{II.95})$$

$$C_4' = A_1 e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)} C_5 \quad (\text{II.96})$$

Les équations (II.89) et (II.90) donnent :

$$C_3 = \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b)} + \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)}}{2} C_5 \quad (\text{II.97})$$

Et

$$C_3' = \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} + \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)}}{2} C_5 \quad (\text{II.98})$$

Prenons :

$$C_3 = \frac{A_0 A_2 e^{i(k_1-k_2)(b)} + A_1 A_3 e^{i(k_1+k_2)(b)}}{2} C_5 \quad (\text{II.99})$$

$$C_3' = \frac{A_0 A_4 e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} + A_1 A_5 e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)}}{2} C_5 \quad (\text{II.100})$$

Les équations (II.87) et (II.88) donnent :

$$C_2 = \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b-a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta} (k_2/k_1)} +$$

**CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST
DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION**

$$\begin{aligned}
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{i(k_2-k_1)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2+k_1)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2+k_1)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} C_5
 \end{aligned} \tag{II.101}$$

Et

$$C'_2 =$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} C_5
 \end{aligned} \tag{II.102}$$

On pose :

$$C_2 =$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{A_0 A_2 A_6 e^{i(k_1-k_2)(b-a/2)} + A_1 A_3 A_7 e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{i(k_2-k_1)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{A_0 A_2 A_8 e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2+k_1)(a/2)} + A_1 A_3 A_9 e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2+k_1)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} C_5
 \end{aligned} \tag{II.103}$$

$$C'_2 =$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{A_0 A_4 A_{10} e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)} + A_1 A_5 A_{11} e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{A_0 A_4 A_{12} e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(a/2)} + A_1 A_5 A_{13} e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} C_5
 \end{aligned} \tag{II.104}$$

Les équations (II.85) et (II.86) donnent :

**CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST
DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION**

$$\begin{aligned}
 C_1 = \frac{1}{2} & \left[\frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1 - k_2)(b - a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \right. \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1 + k_2)(b)} e^{i(k_2 - k_1)(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1 - k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2 + k_1)(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) e^{i(k_1 + k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2 + k_1)(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1 - k_2)(b)} e^{-i(k_1 + k_2)(a/2)} e^{i(k_1 + k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1 + k_2)(b)} e^{-i(k_1 + k_2)(a/2)} e^{i(k_1 + k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1 - k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(a/2)} e^{i(k_1 + k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \\
 & \left. \frac{\mu^\alpha \left(\frac{\mu^\beta k_2 - 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \left(\frac{\mu^\beta k_2 + 1}{k_1} \right) \mu^\alpha \left(1 - \frac{\mu^\beta k_2}{k_1} \right) e^{i(k_1 + k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(a/2)} e^{i(k_1 + k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} \right] C_5
 \end{aligned}$$

(II.105)

On pose :

$$\begin{aligned}
 C_1 = & \frac{1}{2} \left[\frac{A_0 A_2 A_6 A_{14} e^{i(k_1 - k_2)(b - a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)} + A_1 A_3 A_7 A_{15} e^{i(k_1 + k_2)(b)} e^{i(k_2 - k_1)(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} + \right. \\
 & \left. \frac{A_0 A_2 A_8 A_{16} e^{i(k_1 - k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2 + k_1)(a/2)} e^{i(k_1 - k_2)(b + a/2)}}{4\mu^{\alpha + \beta} (k_2/k_1)} \right]
 \end{aligned}$$

CHAPITRE II : CALCUL ANALYTIQUE DES FONCTIONS D'ONDE EST DES COEFFICIENTS DE TRANSMISSION

$$\begin{aligned}
 & \frac{A_1 A_3 A_9 A_{17} e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_2+k_1)(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(b+a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{A_0 A_2 A_6 A_{18} e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)} e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{A_1 A_3 A_7 A_{19} e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{-i(k_1+k_2)(a/2)} e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \frac{A_0 A_2 A_6 A_{20} e^{i(k_1-k_2)(b)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1-k_2)(a/2)} e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} + \\
 & \left. \frac{A_1 A_3 A_7 A_{21} e^{i(k_1+k_2)(b)} e^{i(k_2-k_1)(a/2)} e^{2ik_1(a/2)} e^{i(k_1+k_2)(b+a/2)}}{4\mu^{\alpha+\beta}(k_2/k_1)} \right] C_5 \tag{II.106}
 \end{aligned}$$

(II.106)

On posons :

$$C_1 = \frac{1}{2} D C_5$$

On introduit le **coefficient de transmission** T des barrières $T = \left| \frac{C_5}{C_1} \right|^2$ Etant donné que dans les **régions (I) et (V)** la fonction d'onde admet le même vecteur d'onde k_1 , on

aura donc :

$$T = |C_5/C_1|^2 = \left| \frac{2}{D} \right|^2$$

III.1.INTRODUCTION :

L'étude du coefficient de transmission est d'une grande importance pour la connaissance des caractéristiques électriques (intensité, courant) des semi conducteurs non uniformes, il est connue qu'il doit tendre vers l'unité quand l'énergie augmente indéfiniment. 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.

III.2.Graphes des coefficients de transmission et leur analyse

III.2.1. Marche en potentiel et en masse

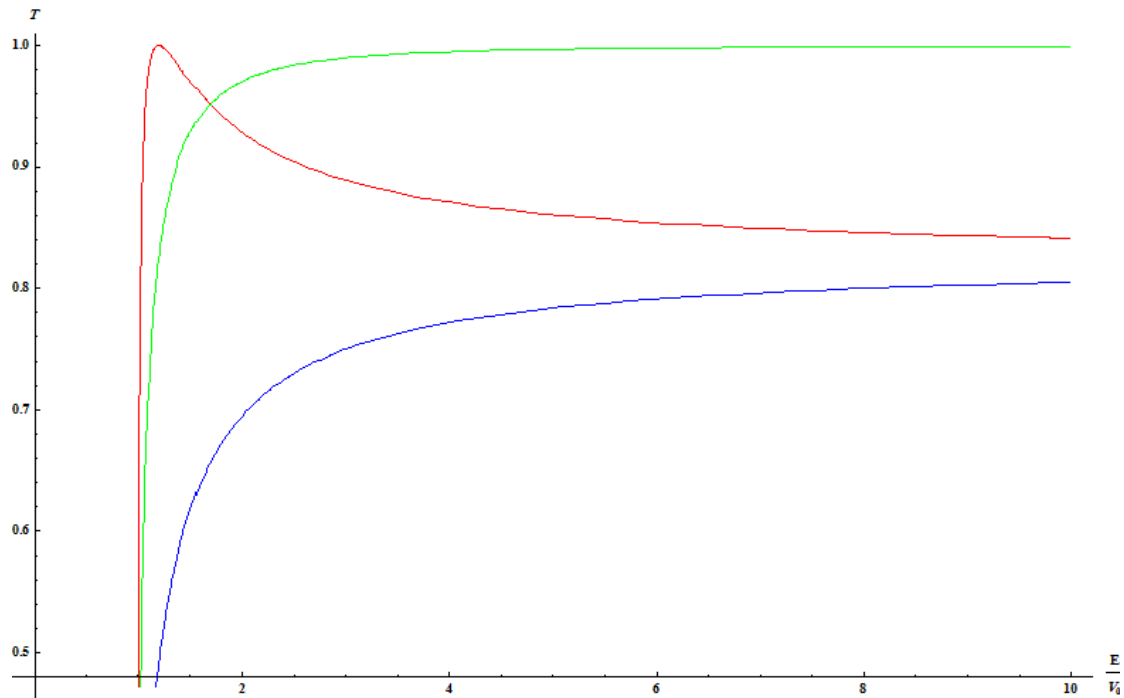


FIG.1. variation du coefficient de transmission à travers une marche de potentiel 1 en fonction de l'énergie

Dans le figure 1 on observe les trois graphes du coefficient de transmission en fonction de l'énergie alors maintenant :

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

Le coefficient de transmission tend asymptotiquement vers l'unité. En effet, il y a une augmentation de l'énergie.

Le deuxième graphe (rouge) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 1/6$

le coefficient de transmission augmente rapidement jusqu'à ce que l'unité. Puis il diminue doucement jusqu'à la valeur asymptotique $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}$

Lorsqu'il est inférieur à l'unité.

Le troisième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 6$

Le coefficient de transmission augmente lentement, jusqu'à atteindre la valeur asymptotique $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}$.

III.2.2. Potentiel et masse rectangulaires

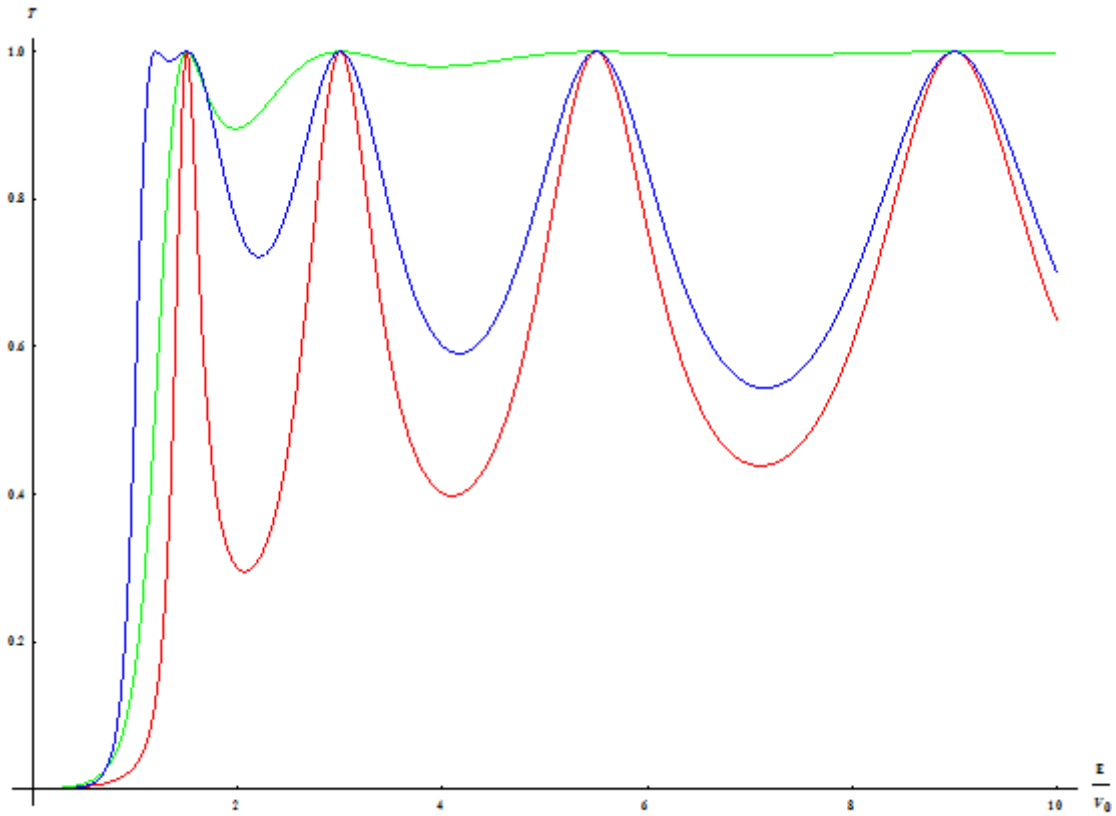


FIG.1. variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel en masse en fonction de l'énergie

Dans le figure 2 on observe les trois graphes du coefficient de transmission en fonction de l'énergie alors maintenant :

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

CHAPITRE III : RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSIONS

Le coefficient de transmission est soumise à des oscillations très rapides, Et que, lorsqu'elle est $E > V_0$. Pratiquement la transmission est complète déjà à partir de la valeur $E = 3V_0$.

Le deuxième graphe (rouge) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 1/6$

Le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale (inférieure asymptotique $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}$) et l'unité avec $E > V_0$. Le coefficient de transmission ne va pas à l'unité comme l'énergie augmente.

Le troisième graphe (bleu) Pour $\frac{m_1}{m_2} = 6$

Le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}$ et l'unité pour $E > V_0$. Avec le Plus l'énergie augmente et plus les minima du coefficient de transmission diminuent.

CONCLUSION

Nous avons traité dans ce mémoire des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position (**PDM**), ceux-ci jouent un grand rôle dans les travaux de recherche actuelle, en particulier les modèles avec structure non homogène. Ces modèles avec hétérostructures sont utilisés pour la description des propriétés électroniques des semi-conducteurs, en physique nucléaire, en physique de la matière condensée, dans le domaine des cristaux liquides ainsi que dans les théories des puits et points quantiques...

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

Dans le second chapitre, nous avons résolu l'équation de Schrödinger généralisée analytiquement pour les différents cas de masse et de potentiel. Les expressions analytiques exactes des fonctions d'onde ainsi que des coefficients de transmission et de réflexion y découlant y sont données.

On a réétudié les cas d'une marche abrupte et d'une barrière rectangulaire en potentiel et en masse, confirmant les résultats obtenus par Lévy-Leblond.

On y a montré que le coefficient de transmission tend vers l'unité quand l'énergie tend vers l'infini.

Dans le troisième chapitre, une analyse multi variable des courbes des coefficients de transmission en fonction des variations de l'énergie, du rapport des masses.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. Petersen, “Theoretical Investigation of the Resonant Tunneling Phenomena and its Applications in Resonant Tunneling Diodes”, Mini-project, 6th Semestre Nano-Physics Student, Aalborg University (2007).
- [2] J. Smoliner , D. Rakoczy, M. Kast, “Hot electron spectroscopy and microscopy”, Phys, Vol 67, Issue 10, 1863, (2004).
- [3] O. Pinaud, ” Transient simulations of a resonant tunneling diode”, Journal of Applied Physics, vol. 92, Issue 4, 1987, (2002).
- [4] P. Ring and P. Shuck, “The Nuclear Many-Body Problem” (Springer-Verlag, New York, (1980).
- [5] A.C. Cheung, D.M. Rank, C.H. Townes, D.D. Thornton, and W.J. Welch, ” Le Puits Double L’Exemple Standard de la Molécule d’Ammoniac”, Phys. Rev. Lett., Vol. 21 No25, (1968).
- [6] Víctor M. Villalba and Luis A. González-Árraga, “Tunneling and transmission resonances of a Dirac particle by a double barrier”, Phys. Scr. 81, 025010, (2010).
- [7] H.Panahiand Z.Bakhshi, “Dirac equation with position-dependent effective mass and solvable potentials in the Schrodinger equation”, J. Phys. A: Math. Theor. 44, 175304, (2011).
- [8] B. Gonul, O. Ozer, B. Gonul, F. Uzgun, “ Exact solutions of effective-mass Schrödinger equations” , arXiv:quant-ph/0211113.
- [9] J.P. Killingbeck, “The Schrödinger equation with position-dependent mass”, J. Phys. A: Math. Theor. 44, 285208, (2011).
- [10] P. Jha, H. Eleuch, Y. Rostovtsev, “Analytical solution to position dependent mass Schrödinger equation”, Journal of Modern Optics, Vol. 58, Issue 8, 652, (2011).
- [11] R. Koc, M. Koca, ” A systematic study on the exact solution of the position dependent mass Schrödinger equation”, J. Phys. A: Math. Gen. 36, 8105, (2003).
- [12] R. Sever and C. Tezcan, “ Exact solution of Schrödinger equation for modified Kratzer’s molecular potential with the position-dependent mass”, Int. J. Mod. Phys. E 17, 1327, (2008).
- [13] A. de Souza Dutra, C. A. S. Almeida, “Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses”, Phys. Lett. A275, 25, (2000).
- [14] S.M. Ikhdair, “Effective Schrödinger equation with general ordering ambiguity position-dependent mass Morse potential”, Molecular Physics, vol. 110, Issue 13,

1415, (2012).

[15] R. N. Costa Filho, M. P. Almeida, G. A. Farias, and J. S. Andrade Jr, “Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass”, <http://arxiv.org/abs/1110.1582>.

[16] B. Midya, “Nonsingular potentials from excited state factorization of a quantum system with position dependent mass”, *Journal of Physics A* 44, 435306, (2011).

[17] Ju Guo Xing, Cai Chang Ying, Xiang Yang, and Ren Zhong Zhou, “Coordinate Transformation and Exact Solutions of Schrödinger Equation with Position Dependent Effective Mass”, *Theory Phys.*, Vol 47, Issue 6, 1001, (2007).

[18] C. Quesne, “Point Canonical Transformation versus Deformed Shape Invariance for Position-Dependent Mass Schrödinger Equations”, arXiv:0807.4650v2

[19] B. Gonul, B. Gonul, D. Tutcu and O. Ozer, “Supersymmetric approach to exactly solvable systems with position-dependent effective masses”, *Modern Physics Letters A*, Volume 17, Issue 31, 2057, (2002).

[20] R. Koc, H. Tutunculer, “Exact solution of position dependent mass Schrödinger equation by supersymmetric quantum mechanics”, arXiv:quant-ph/0410088.

[21] G.A. Kerimov, “Exactly solvable position-dependent mass Hamiltonians related to non-compact semi-simple Lie groups”, *J. Phys. A: Math. Theor.* 42, 445210, (2009).

[22] 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, (1994).

[23] L. Chetouani, L. Dekar and T. F. Hammann, “Green’s functions via path integrals for systems with position-dependent masses”, *Phys. Rev. A* 52, 82 (1995).

[24] L. Dekar, ” Etude Quantique de Modèles Avec Potentiels et Masses Spatio-Dépendents de Types Constants par Morceaux et de Types Marches Douces ”, thèse de Doctorat, Université de Haute Alsace à Mulhouse France, (1999).

[25] A. Arda and R. Sever, ” Bound State Solutions of Schrödinger Equation for Generalized Morse Potential with Position-Dependent Mass”, *Theor. Phy*, Vol 56, Issue 1, 51, (2011).

[26] L. Esaki , “Long Journey Into Tunneling”, IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, N.Y., USA, Nobel Lecture (1973).

[27] E. Diez, F.D. Adame, A. Sánchez, “Nonlinear resonant tunnelling through doublebarrier structures”, arXiv:cond-mat/9410092v1

- [28] P. Carpena, J.A. Lopez Villanueva, V. Gasparian, “Energy dependence of the effective mass in the envelope-function approximation”, *Physic B* 253, 242, (1998).
- [29] 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).
- [30] X.Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt and A.Schadle, “A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations”, Takustraße 7 D-14195 Berlin-Dahlem Germany, ZIB-Report 07-34 (Novembre 2007).
- [31] O.Von Roos, “Position-dependent effective masses in semiconductor theory”, *Phys. Rev. B* 27, 7547, (1983).
- [32] T. Gora, F. Williams, “Theory of Electronic States and Transport in Graded Mixed Semiconductors”, *Phys. Rev.* 177, 1179, (1969).
- [33] D.J. Ben Daniel, C.B. Duke, “Space-Charge Effects on Electron Tunneling”, *Phys. Rev.* 152, 683, (1966).
- [34] Q.-G. Zhu and H. Kroemer, “Interface connection rules for effective-mass wave functions at abrupt heterojunction between two different semi-conductors”, *Phys. Rev. B* 27, 3519, (1983).
- [35] T. Li, K.J. Kuhn, “Band-offset ratio dependence on the effective-mass Hamiltonian based on a modified profile of the GaAs-Al_xGa_{1-x}As quantum well”, *Phys. Rev. B* 47, 12760, (1993).
- [36] O. Mustafa, S. Habib Mazharimousavi, “Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators”, *Int. J.Theory.Phys.* 46, 1786, (2007).
- [37] J.M. Lévy-Leblond, “Position-dependent effective mass and Galilean invariance”, *Phys. Rev.* A52, 1845, (1995).
- [38] L. Dekar, L. Chetouani and T. F. Hammann, “Wave function for smooth potential and mass step”, *Phys. Rev.*, A59, 107, (1999).
- [39] O.Von Roos and H.Mavromatis, position-dependent effective masses in semiconductors theory.II, *Phys.Rev.B* 31, 2294-2298(1985).
- [40] A. de Souza Dutra, C.A.S. Almeida, Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses, *Phys.A* 275. 25–30(2000)
- [41] J.-M. Lévy-Leblond, "Elementary quantum models with position-dependent mass," *Eur .J. Phys.* **13**, 215-218 (1992).

Résumé :

Ce travail est une contribution à l'étude de système avec masse efficace dépendent de la position (**PDM**). Et donner un outil d'analyse de phénomène de transport dans les hétérostructures semiconductrices. Cela est devenu indispensable pour la prédiction des performances de ces nouveaux matériaux. Dans ces matériaux, la masse effective des porteurs de charge dépend de la position. Se pose alors le problème du choix de l'hamiltonien généralisé à des masses dépendant de la position. Nous y étudions un système unidimensionnel avec une barrière en potentiel et en masse pour cerner l'hamiltonien proposé par Von Roos

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + V$$

Nous avons calculé les fonctions d'ondes résultant de l'équation de Schrödinger généralisée pour différentes formes de potentiels et de masses dépendant de la position, et l'on a déduit les coefficients de transmission et de réflexion. Nous avons aussi étudié les coefficients de transmission en fonction de l'énergie.

Mots clés : l'équation de Schrödinger généralisée, la masse effective

ملخص :

هذا العمل هو المساهمة في دراسة النظام مع كتلة فعالة المتعلقة بالموضع (**PDM**). و إعطاء أداة تحليل لظاهرة النقل في أنصاف النواقل ذات البنيات المختلفة . وهذا أصبح ضروري لتبؤ بنتائج جيدة لهذه المواد الجديدة . في هذه المواد تكون الكتلة الفعلية لحوامل الشحنة متعلقة بالموضع . وهذا يطرح مشكل إختيار الهملتونيا التي تكون فيه الكتلة متعلقة بالموضع . هنا ندرس نظام ذات بعد واحد مع حاجز الكمون و الكتلة لكي نحاصر الهملتونيا المقترح من طرف فون

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + V$$

روس : قمنا بحساب الدوال الموجية الناتجة عن معادلة شرودنجر المعممة من أجل أشكال مختلفة للكمونات و الكتل التي تكون متعلقة بالموضع و التي منها نستخلص معاملات العبور و الانعكاس . و بعد ذلك ندرس معاملات العبور بدلالة الطاقة .

الكلمات المفتاحية : معادلة شرودنجر المعممة , الكتلة الفعالة

Abstract:

This Work is a contribution for study of system with effective mass dépend on the position (**PDM**). and to give a tool for analysis of transport phenomenon in semiconductor heterostructures. That became essential for the prediction of the performances of these new materials. In these materials, the effective mass of the charge carriers depends on the position. Then the problem of the choice of the generalized hamiltonian with position dependent mass is posed. We study a one-dimensional system with potential and mass barriers to surround the hamiltonian suggested by Von Roos:

$$H = \frac{1}{4} (m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + V$$

We have calculated the wave's functions resulting from the generalized Schrödinger equation for various shapes of position dependent potentials and masses. We have deducted the transmission and reflection coefficients. And afterwards, we study the transmission coefficients according to energy.

Keys words : the generalized Schrödinger equation, the effective mass