

# 1 Problématique et Définition du Système

Nous étudions le comportement d'une particule quantique de masse  $m$  et d'énergie  $E$  soumise à un potentiel périodique fini. Ce potentiel est constitué d'une succession de barrières rectangulaires.

**Définition 1.1 (Potentiel Périodique Fini).** *Le potentiel  $V(x)$  est défini comme suit :*

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \in \bigcup_{k=-n}^n [2ka, (2k+1)a] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où  $V_0 > 0$  est la hauteur des barrières,  $a > 0$  est une longueur caractéristique (la largeur des barrières et des puits) et  $n \in \mathbb{N}^*$  définit le nombre de périodes du potentiel. La structure est composée de  $2n + 1$  barrières et  $2n$  puits.

L'état de la particule est décrit par sa fonction d'onde  $\psi(x)$ , solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Nous nous intéressons au cas de la diffusion où  $0 < E < V_0$ .

L'équation (1) est résolue séparément dans les régions où le potentiel est constant.

## 1.1 Régions I : Barrières de potentiel ( $V(x) = V_0$ )

Dans les intervalles  $[2ka, (2k+1)a]$ , l'équation devient :

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi_I(x)$$

Puisque  $E < V_0$ , le terme  $V_0 - E$  est positif. Nous posons  $\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ , avec  $\alpha \in \mathbb{R}^+$ .

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = \alpha^2 \psi_I(x)$$

La solution générale est une superposition d'ondes évanescentes :

$$\psi_I(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \quad (A, B \in \mathbb{C}) \quad (2)$$

## 1.2 Régions II : Puits de potentiel ( $V(x) = 0$ )

Dans les intervalles où  $V(x) = 0$ , l'équation s'écrit :

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{II}(x)$$

Puisque  $E > 0$ , nous posons  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , avec  $k \in \mathbb{R}^+$ , le nombre d'onde.

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = -k^2 \psi_{II}(x)$$

La solution générale est une superposition d'ondes planes progressives et régressives :

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad (C, D \in \mathbb{C}) \quad (3)$$

## 2 Méthode de la Matrice de Transfert

Pour résoudre le problème global, nous utilisons la méthode de la matrice de transfert, qui relie la fonction d'onde et sa dérivée d'un point à un autre.

### 2.1 Le Vecteur d'État et la Matrice de Propagation

**Définition 2.1 (Vecteur d'État).** En tout point  $x$ , l'état du système est complètement décrit par le vecteur d'état  $\Phi(x)$ , un vecteur colonne contenant la fonction d'onde et sa dérivée première :

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}$$

La continuité de  $\psi(x)$  et  $\psi'(x)$  aux frontières entre les régions assure que  $\Phi(x)$  est continu partout. Pour une région où le potentiel est constant, il existe une matrice de propagation  $P(L)$  telle que :

$$\Phi(x_0 + L) = P(L) \cdot \Phi(x_0)$$

### 2.2 Matrice de Propagation dans une Région II (Puits)

**Propriété 2.1 (Matrice  $P_{II}(L)$ ).** La matrice de propagation pour une distance  $L$  dans une région où  $V(x) = 0$  est :

$$P_{II}(L) = \begin{pmatrix} \cos(kL) & \frac{1}{k} \sin(kL) \\ -k \sin(kL) & \cos(kL) \end{pmatrix}$$

### 2.3 Matrice de Propagation dans une Région I (Barrière)

**Propriété 2.2 (Matrice  $P_I(L)$ ).** La matrice de propagation pour une distance  $L$  dans une région où  $V(x) = V_0$  (avec  $E < V_0$ ) est :

$$P_I(L) = \begin{pmatrix} \cosh(\alpha L) & \frac{1}{\alpha} \sinh(\alpha L) \\ \alpha \sinh(\alpha L) & \cosh(\alpha L) \end{pmatrix}$$

**Remarque 2.1.** Pour ces deux matrices, le déterminant est égal à 1. Cette propriété est fondamentale car elle assure la conservation du Wronskien, et donc du courant de probabilité.

## 3 Construction de la Matrice de Transfert Totale

### 3.1 Matrice pour une Cellule Unitaire

Notre potentiel est une succession de barrières et de puits, chacun de largeur  $a$ . Nous définissons une cellule unitaire comme une barrière de largeur  $a$  suivie d'un puits de largeur  $a$ . La matrice de transfert pour une telle cellule,  $M_{cell}$ , est obtenue en multipliant les matrices de propagation correspondantes. L'ordre de multiplication est important :

en propageant de gauche à droite, on applique d'abord la matrice de la première région (barrière), puis celle de la seconde (puits).

$$M_{cell} = P_{II}(a) \cdot P_I(a)$$

En utilisant les notations  $c_k = \cos(ka)$ ,  $s_k = \sin(ka)$ ,  $c_\alpha = \cosh(\alpha a)$  et  $s_\alpha = \sinh(\alpha a)$  :

$$\begin{aligned} M_{cell} &= \begin{pmatrix} c_k & s_k/k \\ -ks_k & c_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\alpha & s_\alpha/\alpha \\ \alpha s_\alpha & c_\alpha \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_k c_\alpha + \frac{\alpha}{k} s_k s_\alpha & \frac{1}{\alpha} c_k s_\alpha + \frac{1}{k} s_k c_\alpha \\ -ks_k c_\alpha + \alpha c_k s_\alpha & -\frac{k}{\alpha} s_k s_\alpha + c_k c_\alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

### 3.2 Puissance de la Matrice de la Cellule Unitaire

La structure du potentiel est  $B_{-n}W_{-n}\dots W_{n-1}B_n$ . Cela correspond à  $2n$  cellules unitaires ( $B_jW_j$ ), suivies d'une barrière finale  $B_n$ . La matrice de transfert totale, reliant l'état à l'entrée  $x_{in} = -2na$  à la sortie  $x_{out} = (2n+1)a$ , est :

$$M_{total} = P_I(a) \cdot \underbrace{(P_{II}(a)P_I(a))}_{M_{cell}} \cdots \underbrace{(P_{II}(a)P_I(a))}_{M_{cell}} = P_I(a) \cdot (M_{cell})^{2n}$$

Pour calculer  $(M_{cell})^N$ , nous utilisons un théorème lié aux polynômes de Chebychev.

**Théorème 3.1 (Puissance d'une matrice 2x2 de déterminant 1).** Soit  $M$  une matrice de taille 2x2 avec  $\det(M) = 1$ . Alors pour tout entier  $N \geq 1$ , sa puissance  $N$ -ième est donnée par :

$$M^N = U_{N-1}(\chi)M - U_{N-2}(\chi)I$$

où  $I$  est la matrice identité,  $\chi = \frac{1}{2}\text{Tr}(M)$ , et  $U_n$  est le polynôme de Chebychev de seconde espèce d'ordre  $n$ .

Calculons  $\chi$  pour notre matrice  $M_{cell}$  :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(M_{cell}) &= (c_k c_\alpha + \frac{\alpha}{k} s_k s_\alpha) + (-\frac{k}{\alpha} s_k s_\alpha + c_k c_\alpha) \\ &= 2c_k c_\alpha + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right) s_k s_\alpha \\ \chi &= \frac{1}{2}\text{Tr}(M_{cell}) = \cos(ka) \cosh(\alpha a) + \frac{\alpha^2 - k^2}{2k\alpha} \sin(ka) \sinh(\alpha a) \end{aligned}$$

En remplaçant  $\alpha^2$  et  $k^2$  par leurs expressions en fonction de  $E$  et  $V_0$  :

$$\chi = \cos(ka) \cosh(\alpha a) + \frac{V_0 - 2E}{\sqrt{4E(V_0 - E)}} \sin(ka) \sinh(\alpha a)$$

La matrice  $(M_{cell})^{2n}$  peut donc être exprimée analytiquement en fonction de  $\chi$ .

### 3.3 Expression de la Matrice Totale $M_{total}$

Posons  $(M_{cell})^{2n} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ . Ses éléments sont :

$$A = U_{2n-1}(\chi)(m_{11}) - U_{2n-2}(\chi)$$

$$B = U_{2n-1}(\chi)(m_{12})$$

$$C = U_{2n-1}(\chi)(m_{21})$$

$$D = U_{2n-1}(\chi)(m_{22}) - U_{2n-2}(\chi)$$

où les  $m_{ij}$  sont les éléments de  $M_{cell}$ . Finalement, la matrice totale  $M_{total} = P_I(a) \cdot (M_{cell})^{2n}$  est :

$$M_{total} = \begin{pmatrix} c_\alpha & s_\alpha/\alpha \\ \alpha s_\alpha & c_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_\alpha A + \frac{s_\alpha}{\alpha} C & c_\alpha B + \frac{s_\alpha}{\alpha} D \\ \alpha s_\alpha A + c_\alpha C & \alpha s_\alpha B + c_\alpha D \end{pmatrix}$$

Notons les éléments de cette matrice finale  $M_{ij}$ .  $M_{11} = c_\alpha A + \frac{s_\alpha}{\alpha} C$ , etc.

## 4 Résolution du Problème de Diffusion

### 4.1 Conditions aux Limites

Nous considérons une onde incidente venant de  $x \rightarrow -\infty$ .

— Pour  $x \leq x_{in} = -2na$ ,  $\psi_{gauche}(x) = A_{in}e^{ikx} + B_{in}e^{-ikx}$ .

— Pour  $x \geq x_{out} = (2n+1)a$ ,  $\psi_{droite}(x) = A_{out}e^{ikx}$ .

Les vecteurs d'état aux frontières sont :

$$\Phi(x_{in}) = \begin{pmatrix} A_{in}e^{-i2nka} + B_{in}e^{i2nka} \\ ik(A_{in}e^{-i2nka} - B_{in}e^{i2nka}) \end{pmatrix}$$

$$\Phi(x_{out}) = \begin{pmatrix} A_{out}e^{ik(2n+1)a} \\ ikA_{out}e^{ik(2n+1)a} \end{pmatrix}$$

L'équation  $\Phi(x_{out}) = M_{total} \cdot \Phi(x_{in})$  relie ces coefficients.

### 4.2 Calcul des Coefficients de Réflexion et de Transmission

**Définition 4.1** (Coefficients de diffusion). *Le coefficient de réflexion est  $r = B_{in}/A_{in}$  et le coefficient de transmission est  $t = A_{out}/A_{in}$ .*

En résolvant le système matriciel pour  $r$  et  $t$  (en posant  $A_{in} = 1$ ), on obtient les expressions suivantes en fonction des éléments  $M_{ij}$  de la matrice  $M_{total}$  :

**Propriété 4.1** (Coefficient de Transmission). Le coefficient de transmission  $t$  est donné par :

$$t = \frac{2ike^{-ika}}{M_{22} + ikM_{12} - \frac{1}{ik}M_{21} + M_{11}} \cdot e^{-ik(2na) - ik(2n+1)a}$$

Une forme plus symétrique est :

$$t = \frac{2ike^{-ik(4n+1)a}}{ik(M_{11} + M_{22}) - (M_{21} - k^2M_{12})}$$

**Propriété 4.2 (Coefficient de Réflexion).** Le coefficient de réflexion  $r$  est donné par :

$$r = e^{-i4nka} \frac{ik(M_{11} - M_{22}) - (M_{21} + k^2 M_{12})}{ik(M_{11} + M_{22}) + (M_{21} - k^2 M_{12})}$$

Les probabilités de transmission  $T = |t|^2$  et de réflexion  $R = |r|^2$  vérifient  $R + T = 1$ .

## 5 Reconstruction Complète de la Fonction d'Onde

Une fois  $r$  et  $t$  calculés pour une énergie  $E$  donnée, la fonction d'onde  $\psi(x)$  est déterminée de manière unique sur tout l'axe réel (à une normalisation globale près, fixée par  $A_{in} = 1$ ).

### 5.1 Fonction d'onde dans les régions extérieures

- Pour  $x \leq -2na$  :  $\psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$
- Pour  $x \geq (2n+1)a$  :  $\psi(x) = t e^{ikx}$

### 5.2 Fonction d'onde à l'intérieur du potentiel

Pour tout point  $x \in [-2na, (2n+1)a]$ , la fonction d'onde est la première composante du vecteur d'état  $\Phi(x)$ , qui est obtenu en propageant l'état initial  $\Phi(x_{in})$  :

$$\Phi(x) = M_{x_{in} \rightarrow x} \cdot \Phi(x_{in})$$

où  $x_{in} = -2na$  et  $\Phi(x_{in}) = \begin{pmatrix} e^{-i2nka} + r e^{i2nka} \\ ik(e^{-i2nka} - r e^{i2nka}) \end{pmatrix}$ . La matrice de propagation  $M_{x_{in} \rightarrow x}$  dépend de l'intervalle où se trouve  $x$ .

- **Si  $x$  est dans la barrière  $B_j$** ,  $x \in [2ja, (2j+1)a]$  pour  $j \in \{-n, \dots, n\}$  : La propagation jusqu'au début de la barrière se fait via  $(M_{cell})^{j+n}$ . Ensuite, on propage à l'intérieur de la barrière.

$$M_{x_{in} \rightarrow x} = P_I(x - 2ja) \cdot (M_{cell})^{j+n}$$

- **Si  $x$  est dans le puits  $W_j$** ,  $x \in [(2j+1)a, (2j+2)a]$  pour  $j \in \{-n, \dots, n-1\}$  : La propagation jusqu'au début du puits se fait via  $P_I(a) \cdot (M_{cell})^{j+n}$ . Ensuite, on propage à l'intérieur du puits.

$$M_{x_{in} \rightarrow x} = P_{II}(x - (2j+1)a) \cdot P_I(a) \cdot (M_{cell})^{j+n}$$

Dans chaque cas,  $(M_{cell})^{j+n}$  est calculé à l'aide du théorème des polynômes de Chebychev. La fonction d'onde  $\psi(x)$  est alors la première composante du vecteur résultant  $\Phi(x)$ .