

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 $s_\alpha = \sinh(\alpha a)$:

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

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 χ 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 α^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 χ .

3.3 Expression de la Matrice Totale M_{total}

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

$$\begin{aligned} A &= U_{2n-1}(\chi)(m_{11}) - U_{2n-2}(\chi) \\ B &= U_{2n-1}(\chi)(m_{12}) \\ C &= U_{2n-1}(\chi)(m_{21}) \\ D &= U_{2n-1}(\chi)(m_{22}) - U_{2n-2}(\chi) \end{aligned}$$

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

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 $\Phi(x_{in}) = \begin{pmatrix} e^{-i2nka} + re^{i2nka} \\ ik(e^{-i2nka} - r e^{i2nka}) \end{pmatrix}$. 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 $\Phi(x)$.