UNIVERSITÉ YAHIA FARÈS DE MÉDÉA

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIÈRE



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de **Master**

En Physique

Spécialité : Physique Théorique

Par :

DERIADI Naima
SAOULA Nesrine

Thème :

Résolution de l'équation de Dirac généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position

Évalué le 15 /07/2021, par le jury composé de :

Dr. MEKHTICHE Abdelhalim	Grade : MCB	Université de Médéa	Président
Dr. BOUCHACHIA Karim	Grade : MCB	Université de Médéa	Examinateur
Dr. CHERROUD Othmane	Grade : MCB	Université de Médéa	Examinateur
Dr. DEKAR Liès	Grade : MCA	Université de Médéa	Promoteur

Année universitaire 2020-2021





Dédicace

A mes très chèrs mère et père.

À mes très chères sœurs Fatima, Karima,Ahlame, Maryame, Nabila et Maroua.

À mes chères neveu et nièces Noure, Mohamed Yousef et Aridje

À tous les membres de ma famille, petits et grands.

À mes très chères amies Imane Sayah, Sara, Hajer, Asala. Nabila et Bouchra.

Et spécialement à mon binôme de ce travail Deriadi Naima.

Aux camarades de ma promotion.

Nesrine

pngtree.com



Dédicace

Je dédie ce modeste travail tout d'abord aux personnes les plus chères et proches de mon cœur, celles qui représentent ma raison d'être et mon espoir d'exister et à qui je dois tout mon succès et ma réussite et qui ont le droit de recevoir mes chaleureux remerciements pour le courage et le sacrifice qu'ils ont consentis pendant la durée de mes études en leurs souhaitant une longue vie pleine de joie et de santé, mes parents.

A tous mes très chers frères : Ahmed et Djaafar.

A mon grand frère Hamza, son épouse Hanane et ses enfants.

A ma grande sœur Souad, son mari Kamel et ses enfants.

A ma sœur Fatiha, son mari Hamid et ses enfants.

A ma sœur Aida, son mari Ibrahim et sa petite fille.

A ma sœur Sihem, son mari Mohammed et sa petite fille.

A mon binôme Saoula Nesrine, pour sa sincère amitié, son soutien permanent me remontant le moral par ses conseils qui m'incitent à relever les défis.

A toutes mes amies de la cité universitaire spécialement Wafa, Nesrine, Fayza et Asma.

A tous mes amis de la section physique théorique et de l'autre section physique de matériaux.

En définitif, à tous ceux et celles qui ont toujours cru en moi.

Naima

pngtree.com



Remerciements



Nous remercions tout d'abord le bon ALLAH, le tout puissant, de nous avoir donné la force et la volonté de bien mener ce travail faisant l'objet du mémoire de fin d'étude. Ce présent mémoire, n'aurait pu voir le jour sans la contribution de nombreuses personnes, dont nous faisons aujourd'hui un plaisir et un devoir de les remercier et de leur témoigner notre profonde gratitude.

A notre promoteur monsieur Liès DEKAR, enseignant à l'université Yahia Farés de Médéa. Nous avons eu le privilège de travailler avec lui et d'apprécier ses qualités et ses valeurs. Sa présence et son sens du devoir nous ont énormément marqués. Qu'il trouve ici l'expression de notre respectueuse considération et notre profonde admiration pour toutes ses qualités scientifiques et humaines.

Notre profonde reconnaissance et notre très grande gratitude vont aussi à monsieur Abdelhalim MEKHTICHE, enseignant à l'université Yahia Farés de Médéa, pour le grand honneur qu'il nous fait en acceptant de présider notre jury.

Nos remerciements s'adressent également à messieurs Karim BOUCHACHIA et Othmane CHERROUD enseignants à l'université Yahia Farés de Médéa, pour nous avoir honorés de leurs présences en acceptant d'évaluer ce travail. Nous n'oublions pas de rendre un vibrant hommage à nos enseignants, à tous les niveaux, pour leurs efforts durant notre formation et à toute personne ayant contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Aussi, nos remerciements vont également à tous les enseignants du Département des Sciences de la Matière et en particulier à ceux qui ont intervenus en Master de Physique Théorique. Sans oublier une pensée à nos camarades de la promotion 2019/2020 en souvenir des moments passés ensemble.

Résumé :

Nous avons étudié l'équation générale de Dirac pour un système à masse dépendant de la position. Nous avons brièvement discuté des équations de Schrödinger et de Klein-Gordon et celle de Dirac. Nous avons également traité les problèmes liés au choix des paramètres d'ambiguïté dans l'expression de l'hamiltonien effectif pour les systèmes quantiques avec masse variable en fonction de la position. Enfin, nous avons présenté la résolution de l'équation de Dirac pour les deux potentiels en pointe et de Woods-Saxon avec des masses qui dépendent de la position. Les solutions pour les états de diffusion ainsi que les coefficients de transmission et de réflexion pour ces deux cas de figure ont été données.

Mots clé : Équation de Dirac relativiste, PDM, potentiel en pointe, potentiel de Woods-Saxon, masse effective, fonction d'onde, spineur, fonction hypergéométrique, fonction de Whittaker.

الملخص:

لقد درسنا معادلة ديراك (Dirac) العامة في نظام الكتلة المعتمدة على الموضع. و تحدثنا بايجاز عن معادلات شرودنغر (Schrodinger) وكلاين-غوردن (Klein –Gordon) وبشكل عام عن معادلة ديراك (Dirac) ,كما تعاملنا ايضا مع المشكلات المتعلقة باختيار معايير الغموض مع تعبير الهاملتوني (hamiltonien) الفعال للانظمة الكمية ذات الكتلة المتغيرة كدالة للموضع. واخيرا, نقدم حل معادلة ديراك (Dirac) بالنسبة للحقلين النقطي ووودس-ساكسون (Woods-Saxon) مع الكتل التي تعتمد على الموضع وتعطى ايضا الحلول لحالات الانتشار ومعاملات الارسال والانعكاس لكلتا الحالتين.

Abstract :

We have studied the general Dirac equation in the position dependent mass system. We have briefly spoken on Schrödinger and Klein-Gordon equations in general and on Dirac equation. We have also dealt with the problems related to the choice of ambiguity parameters on the effective hamiltonian expression for quantum systems with variable mass as a function of position. Finally, we present the solution of the Dirac equation for the cusp and Woods-Saxon potentials with masses which depend on the position. The solutions for the diffusion states as well as the transmission and reflection coefficients for these two cases are given.

Key words: Relativistic Dirac equation, PDM, cusp potential, Woods-Saxon potential, effective mass, wave function, spinor, hypergeometric function, Whittaker function.

Sommaire

Sommaire

Introduction générale……..…01

1. **L`équation de Dirac**……04
   1.1. Équation de Schrödinger……04
   1.2. Équation de Klein-Gordon……...……..05
   1.3. Équation de Dirac……...07
      1.3.1. Formalisme canonique de l`équation de Dirac……..……08
      1.3.2. Covariance de Lorentz pour l`équation de Dirac……..……...…10
      1.3.3. Propriétés des matrices γ et formes bilinéaires covariantes…..…….……11
      1.3.4. Solution générale de l`équation de Dirac……13
2. **Les systèmes à masses dépendant de la position**……..17
   2.1. L`hamiltonien généralisé ..…….……..……...17
      2.1.1. Revue historique …….. 18
   2.2. Nouvelles propriétés des systèmes dépendant de la position ……...…….....24
      2.2.1. Marche en potentiel et en masse ……...…….……..25
      2.2.2. Barrière rectangulaire en potentiel et en masse …….……..27
3. **Résolution de l`équation de Dirac généralisée à des systèmes à masse dépendant de la position** ……30
   3.1. Introduction……31
   3.2. Equation de Dirac avec masse dépendant de la position……...31
   3.3. Cas d'un potentiel en pointe ……32
      3.3.1. Solutions pour les états de diffusion.....34
      3.3.2. Coefficients de réflexion et de transmission ……...36
   3.4. Cas d'un potentiel de Woods-Saxon ……38
      3.4.1. Problème de diffusion de Dirac avec masse effective ……..……39
      3.4.2. Coefficients de réflexion et de transmission ……...44

   3.5 Conclusion…...…….……..48

Conclusion générale ……..50

Appendice ……..52

Bibliographie ……56

Introduction

Introduction

La mécanique quantique est un outil indispensable pour décrire et étudier les phénomènes physiques qui se manifestent à l'échelle atomique et subatomique. Elle est communément subdivisée en mécanique quantique non relativiste et mécanique quantique relativiste : la mécanique quantique non relativiste trouve une large application dans beaucoup de problèmes de physique atomique et de chimie moléculaire où les énergies ne sont pas trop élevées. Pour les phénomènes relevant du domaine des hautes énergies, comme les interactions nucléaires, la mécanique quantique non relativiste s'avère non adéquate et il faut faire appel à la théorie quantique relativiste. Cette dernière se subdivise en fonction du spin de la particule. Dans le cas d'un spin nul elle mène à l'équation de Klein-Gordon, et pour les spins demi-entiers à l'équation de Dirac.

Ces dernières années, l'étude des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position (***Position Dépendent Mass*** ≡ PDM) a connue une grande activité. Ces systèmes ont de larges applications en physique de la matière condensée, dans la théorie des semi-conducteurs, la physique nucléaire, dans les théories des puits et points quantiques 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-Gordon, et Dirac) pour ces systèmes est un aspect important. Notre mémoire traite de la résolution de l'équation de Dirac généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position. Pour atteindre ce but nous avons structuré notre travail en trois chapitres.

Dans le premier, nous commençons par un petit rappel sur les équations de Schrödinger et de Klein-Gordon. Puis, nous rappelons les caractéristiques de l'équation de Dirac : la formulation canonique, la covariance de Lorentz, les

matrices $\boldsymbol{\gamma}$ de Dirac. Nous donnons à titre d'exemple les solutions de l'équation de Dirac pour des particules libres.

Dans le second chapitre nous abordons l'étude quantique de systèmes à masse dépendant de la position. En premier lieu nous discutons les problèmes fondamentaux posés par la dépendance spatiale de la masse, à savoir le choix d'un hamiltonien effectif, les nouvelles conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une hétérojonction, l'ordre des opérateurs masse et impulsion dans l'opérateur énergie cinétique. En second lieu nous donnons quelques exemples de résolution de l'équation généralisée de Schrödinger. Il s'agit des travaux pionniers de **Lévy-Leblond (1992)** pour une barrière abrupte en potentiel et en masse, et de **Dekar (1996)** pour une marche douce en potentiel et en masse. Enfin nous donnons aussi les résultats de travaux faits dans le cadre de deux mémoires de magister encadrés par notre promoteur à l'université de Médéa : celui de **Bouferrache (2010)** [8] sur des barrières simples en potentiel et en masse et celui de **Langueur (2012)** [9] qui a porté sur des doubles barrières en potentiel et en masse.

Le troisième chapitre, présente l'essentiel de notre travail. Nous y détaillons la résolution de l'équation de Dirac généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position. Comme cas particulier nous avons opté pour deux cas, le potentiel en pointe et le potentiel de Woods-Saxon. Dans les deux cas, nous présentons les solutions pour les états de diffusion et les coefficients de transmission et de réflexion. Enfin on termine notre mémoire par une conclusion générale.

Chapitre 1

L'équation de Dirac

1. L'équation de Dirac :

1.1. L'équation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger a été proposée par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925. En mécanique quantique non-relativiste, le mouvement d'une particule libre de masse m, de vecteur impulsion $\vec{p}$, d'énergie E et de fonction d'onde $\psi(t,\vec{r})$ est décrit par l'équation de Schrödinger [1] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{1.1}$$

En effet, à partir de la relation énergie-impulsion classique décrivant le mouvement d'une particule libre de masse m, d'impulsion $\vec{p}$ et d'énergie cinétique E :

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = E, \tag{1.2}$$

on peut obtenir l'équation de Schrödinger en remplaçant le vecteur impulsion et l'énergie par les opérateurs suivants qui s'appliquent à la fonction d'onde $\psi(t,\vec{r})$:

$$\vec{p} \;\rightarrow\; -i\hbar\,\vec{\nabla} \quad \text{et } E \;\rightarrow\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{1.3}$$

Soit donc, en appliquant ces opérateurs à la fonction d'onde $\psi(t,\vec{r})$ représentant la particule :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{1.4}$$

Comme on se placera dans la suite dans le système d'unités naturelles i.e. $(\hbar = c = 1)$, l'équation de Schrödinger s'écrit dans ce cas :

$$-\frac{1}{2m}\vec{\nabla}^2\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{1.5}$$

À partir de l'équation de Schrödinger, on peut obtenir l'équation dite de continuité densité-courant, reliant la densité de probabilité ρ au vecteur courant $\vec{j}$, donnée par :

$$\vec{\nabla} . \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{1.6}$$

où :

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2. \tag{1.7}$$

et

$$\vec{j} = -\frac{i}{2m}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*\right). \tag{1.8}$$

L'opérateur $\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$ correspond à l'hamiltonien décrivant le mouvement d'une particule libre de masse m, de vecteur impulsion $\vec{p}$ et d'énergie E. Schrödinger a calculé les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène en partant de cette équation et a obtenu des valeurs qui sont en bon accord avec les mesures, et notamment les séries de Lyman, Balmer, et Paschen [2].

1.1. L'équation de Klein-Gordon :

La physique des particules ne peut être correctement et totalement décrite dans le cadre de la mécanique quantique. Pour la description des phénomènes aux hautes énergies, il est nécessaire en plus, de travailler dans le contexte de la théorie de la relativité restreinte. En effet, selon la relativité restreinte l'intervalle, défini par $ds^2 = (cdt)^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$ et la norme au carré du quadrivecteur d'énergie-impulsion $p^\mu p_\mu = (E/c)^2 - \vec{p}^2 = m^2c^2$, doivent être les mêmes dans tous les référentiels inertiels. La relativité restreinte introduit une relation dont la portée est beaucoup plus générale puisqu'elle est invariante sous la transformation de Lorentz

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4. \tag{1.9}$$

En appliquant les règles de quantification à l'équation (1.9), on trouve l'équation de Klein-Gordon :

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \Delta\psi(x) + m^2 c^4 \psi(x)\ ; (x) \equiv (x^{\mu}). \tag{1.10}$$

où, x représente à la fois l'espace et le temps de la fonction d'onde, de sorte que $\psi(x) \equiv \psi(r, t)$.

Et comme :

$$p^{\mu} p_{\mu} = (E/c)^2 - p^2 = m^2 c^2.$$

$$p^{\mu} = \begin{pmatrix} E/c = \mathrm{i}\hbar\, \partial/c\, \partial \mathrm{t} \\ \vec{p} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} \end{pmatrix} = \mathrm{i}\hbar\, \partial^{\mu}. \tag{1.11}$$

En appliquant les deux relations (1.10) et (1.11) on trouve :

$$\left(\partial_{\mu}\partial^{\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi(x) = 0. \tag{1.12}$$

Cette équation est une équation covariante qui décrit une particule relativiste libre de masse m et de spin nul, a été suggérée par Erwin Schrödinger en 1926 comme une généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger. Plus tard, elle a été étudiée plus en détail par Oskar Benjamin Klein et Walter Gordon.

Les solutions libres de l'équation (1.10) ou (1.12) sont de la forme :

$$\psi^r(x) = exp\left[-\frac{i\varepsilon_r p_{\mu} x^{\mu}}{\hbar}\right]\ ;\ \begin{cases} \psi^1(x) = e^{-i((p_0 t - px)/\hbar)} \\ \psi^2(x) = e^{i((p_0 t - px)/\hbar)} \end{cases}. \tag{1.13}$$

où :

$$\varepsilon_r = \begin{cases} +1 \ \text{ pour } r = 1 \\ -1 \ \text{ pour } r = 2 \end{cases}.$$

L'équation de Klein-Gordon conduit à des solutions avec des valeurs propres d'énergie positive et négative $E = \pm cp_0$ qui sont séparées par l'intervalle d'énergie interdit $]-mc^2; mc^2[$. Alors que les solutions positives peuvent être interprétées comme des fonctions d'ondes de particules, La signification physique des solutions négatives n'est pas claire à priori. Cela rend la théorie de Klein-Godon peu attrayante en tant que généralisation relativiste de la théorie de Schrödinger [2]. À partir de l'équation (1.12) on obtient l'équation de continuité :

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \tag{1.14}$$

Donc :

$$j^0 = \rho = \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right). \tag{1.15}$$

$$j^i = \vec{j} = -i\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*\right), i = 1, 2, 3. \tag{1.16}$$

Puisque l'équation est du 2ème ordre en temps et en espace. Il n'est donc pas nécessaire que ρ soit positif. Nous avons des probabilités négatives. Mais une théorie avec des probabilités négatives semble absurde. Cela a vaincu toutes les tentatives de faire une théorie sensible à une particule [2].

1.3 L'équation de Dirac :

En 1928 Dirac a cherché une équation relativiste covariante de la forme de l'équation de Schrödinger avec une densité de probabilité définie positive pour remédier aux problèmes de l'équation de Klein-Gordon qui sont :

1- L'inconvénient d'être du second ordre en temps (l'équation de Schrödinger est du premier ordre en temps). L'évolution temporelle nécessite donc la connaissance non seulement de $\psi(t_0)$ mais également de sa dérivée $(\partial_t \psi)_{t=t_0}$.
2- La densité de probabilité peut devenir négative, l'énergie peut l'être aussi, ce qui est inexplicable. Une telle situation n'existe pas avec l'équation de Schrödinger.

Si nous appliquions cette équation à l'atome d'hydrogène, nous ne retrouverions pas les mêmes niveaux d'énergie en structure fine.

1.3.1. Formalisme canonique de l'équation de Dirac :

Dans cette section, on déduit l'équation de Dirac et d'autres relations de base de la théorie de Dirac dans les formulations canonique et covariante de Lorentz. Il s'avère que les solutions de l'équation de Dirac exhibent un degré de liberté intrinsèque qui doit être interprété comme un spin quantique dont le nombre quantique est S = 1/2.

Le point de départ de Dirac est de considérer une généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger pour des particules libres de la forme :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = H_D \psi(x). \tag{1.17}$$

tel que : H_D est l'hamiltonien de Dirac qui s'écrit $H_D = (c\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta mc^2)$. Donc, à partir de l'équation (1.3) et l'hamiltonien de Dirac on trouve l'équation de Dirac :

$$i\frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \left(-i\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + \beta m\right)\psi(x). \tag{1.18}$$

Les coefficients $\vec{\alpha}$ et β ne peuvent pas être simples, sinon l'équation ne serait pas invariante par rapport à une simple rotation spatiale. Elle peut être vue comme une racine carrée de l'équation de Klein-Gordon. Appliquons alors deux fois l'équation de Dirac, on devrait retrouver l'équation de Klein-Gordon et respecter ainsi la relation de dispersion relativiste :

$$-\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial t^2} = \left(-i\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + \beta m\right)\left(-i\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + \beta m\right)\psi(x) = \left(-\vec{\nabla}^2 + m^2\right)\psi(x). \tag{1.19}$$

Ce qui donne les contraintes : les paramètres $\vec{\alpha}$ et β ne peuvent donc pas être des nombres, il faut prendre des opérateurs linéaires, qu'on peut donc représenter par des matrices, qui agissent sur une fonction d'ondes à plusieurs composantes, avec les propriétés :

$$\begin{cases} \alpha^2 = \beta^2 = 1 \\ \alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = 0 \\ \alpha_x\beta + \beta\alpha_x = 0 \end{cases}. \tag{1.20}$$

Ces contraintes impliquent des relations d'anti-commutation qui ne peuvent pas être satisfaites par des nombres simples mais par des matrices quadratiques hermitiennes. En d'autres termes, une équation linéaire relativiste implique une fonction d'onde à plusieurs composantes [2].

De la dernière relation de (1.20), il suit des propriétés de ces opérateurs déduites du système d'équations précédentes :

- Pour que l'hamiltonien H_D soit hermétique, les matrices $\vec{\alpha}$ et β doivent également être hermitiennes (leurs éléments sont des réels).
- Les valeurs propres de $\vec{\alpha}$ et β sont égales ± 1.
- Parce que $(\vec{\alpha})^2 = \beta^2 = 1$, leurs éléments diagonaux (valeurs propres) ne peuvent prendre que les valeurs ± 1.
- De trace nulle (on rappelle que $tr(AB) = tr(BA)$).

  Car :

$$\begin{gathered} \hat{\beta} \times \left(\hat{\alpha}_x\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_x = 0\right) \Rightarrow \hat{\beta}\hat{\alpha}_x\hat{\beta} = -\hat{\alpha}_x \Rightarrow \ tr\left(\hat{\beta}\hat{\alpha}_x\hat{\beta}\right) = tr(\hat{\alpha}_x) \\ = -tr(\hat{\alpha}_x) = 0 \ \ \hat{\beta} \times (\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_x = 1) \\ \Rightarrow \hat{\beta} = -\hat{\alpha}_x\hat{\beta}\hat{\alpha}_x \Rightarrow \ tr\left(\hat{\beta}\right) = -tr\left(\hat{\beta}\right) = 0 \, . \end{gathered} \tag{1.21}$$

Donc leur nombre de lignes et colonnes doit être un nombre pair. Il n'existe que trois matrices hermitiennes 2×2 indépendantes qui satisfont à de telles relations (les matrices de Pauli). Donc on peut trouver une combinaison de 4 matrices de dimensions 4×4 qui vérifient les conditions imposées à $\vec{\alpha}$ et à β. Dirac a proposé la forme suivante de ces matrices :

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma_\iota} \\ \hat{\sigma_\iota} & 0 \end{pmatrix}, \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix}. \tag{1.22}$$

où chaque entrée dans les matrices ci-dessus est un bloc 2×2, et sont les matrices de Pauli, avec

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

L'équation de continuité :

En raison de l'herméticité de l'opérateur de Hamilton, il est attendu à ce que, contrairement à l'équation de Klein-Gordon, l'équation de Dirac permet la définition d'une densité de probabilité définie positive dans le sens de la mécanique quantique non relativiste. Pour le montrer, nous procédons comme suit :

On multiplie (1.18) à gauche par le complexe conjuguée $\psi^\dagger = (\psi_i^*)^T; i = 1,2,3,4$

$$i\psi^\dagger \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = -i\psi^\dagger \vec{\alpha}.\vec{\nabla}\,\psi(x) + \beta m \psi^\dagger \psi(x). \quad (1.24)$$

Et en multipliant ensuite le complexe conjugué de l'équation de Dirac à droite par ψ (tout en tenant compte de ($\vec{\alpha} = \vec{\alpha}^\dagger, \beta = \beta^\dagger$)), nous obtenons :

$$i\frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t}\psi(x) = -i\vec{\alpha}.\vec{\nabla}\,\psi^\dagger \psi(x) + \beta m \psi^\dagger \psi(x). \quad (1.25)$$

La soustraction des deux dernières équations (1.24) et (1.25) conduit à une équation de continuité de la forme :

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{j}(x) = 0 \text{ tels que } \rho = \psi^\dagger \psi \text{ et} \vec{j} = c\,\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi. \quad (1.26)$$

La quantité ρ se présente comme une densité de probabilité définie positive, et $\boldsymbol{j}$ comme une densité de courant de probabilité.

1.3.2 La covariance de Lorentz pour l'équation de Dirac :

Une théorie relativiste appropriée doit être covariante de Lorentz, c'est-à-dire que sa forme doit être invariante sous une transition d'un système inertiel à un autre. Deux observateurs, *A* et *B*, dans des systèmes inertiels différents décrivent le même événement physique avec leurs coordonnées spatio-temporelles particulières et différentes. Soient les coordonnées de l'événement x^μ pour

l'observateur A et x'^{μ} pour l'observateur B. Les deux coordonnées sont connectées au moyen de la transformation de Lorentz [3] :

$$(x')^{v} = \sum_{\mu=0}^{3} a^{v}{}_{\mu} x^{\mu} \equiv a^{v}{}_{\mu} x^{\mu} \equiv (\hat{a}.\vec{x})^{v}. \tag{1.27}$$

Dans la discussion de la théorie de covariance, il faut exprimer l'équation de Dirac dans une notation à quatre dimensions qui conserve la symétrie entre la composante temporelle $x^0 = ct$ et les composantes spatiales $x^i = \nabla^i = \vec{\nabla}$.

En multipliant l'équation (1.18) par β, nous obtenons :

$$i\beta \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} + i\beta \vec{\alpha}.\vec{\nabla}\, \psi(x) - \beta^2 m\psi(x) = 0. \tag{1.28}$$

tels que :

$$\beta^2 = 1, \beta = \gamma^0 \text{ , et } \beta\vec{\alpha} = \gamma^i.$$

Donc :

$$i(\gamma^0 \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} + \gamma^i \vec{\nabla}\, \psi(x)) - m\psi(x) = 0.$$

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi(x) = 0. \tag{1.29}$$

1.3.3 Propriétés des matrices γ et formes bilinéaires covariantes :

On présente quelques propriétés formelles des matrices γ et leurs utilisations pour la construction de formes bilinéaires covariantes.

Système de base complète :

Les quatre matrices γ^{μ} sont linéairement indépendantes, mais elles ne forment pas une base complète pour l'espace à 16 dimensions des matrices 4×4. Mais par de simples multiplications matricielles de γ^{μ}, il est possible de trouver 16 éléments de base linéairement indépendants de cet espace. Ils sont répertoriés dans le tableau suivant :

Notation	Nombre	Forme explicite, $(\Gamma^{(n)})^2 = +\mathbf{1}$	Forme explicite, $(\Gamma^{(n)})^2 = -\mathbf{1}$
$\Gamma^{(S)}: 1$	1	1	
$\Gamma^{(V)}: \gamma^{\mu}$	4	γ^0	$\gamma^1, \gamma^2\gamma^3$
$\Gamma^{(T)}: \gamma^{\mu}\gamma^{v}, \mu < v$	6	$\gamma^0\gamma^1, \gamma^0\gamma^2, \gamma^0\gamma^3$	$\gamma^1\gamma^2, \gamma^1\gamma^3, \gamma^2\gamma^3$
$\Gamma^{(A)}: \gamma^{\mu}\gamma^5$	4	$i\gamma^0\gamma^2\gamma^3, i\gamma^0\gamma^3\gamma^1, i\gamma^0\gamma^1\gamma^2$	$i\gamma^1\gamma^2\gamma^3$
$\Gamma^{(P)}: \gamma^5$	1	$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	

Tab. I.1. Les éléments de base de l'espace des matrices 4×4 [4].

Comme pour les matrices γ elles-mêmes, le carré des matrices résumées par les cinq types $\Gamma^{(n)}$ est égal à $+1$ ou à -1. Les indices supérieurs représentent : (S) pour un scalaire, (V) pour un vecteur, (T) pour un tenseur, (P) pour un pseudo-scalaire, et (A) pour un pseudo-vecteur ou un vecteur axial. Cela indique qu'ils se transforment respectivement comme les matrices correspondantes sous des transformations de Lorentz en combinaison de $\overline{\psi}$ et ψ. La matrice identité est la seule qui commute avec toutes les autres. Chacune des autres matrices commute avec exactement 8 des 16 matrices et anti-commute avec les 8 autres. Il est clair que chaque produit de plus de quatre matrices γ contient nécessairement des matrices avec le même indice de sorte qu'un tel produit peut être relié à l'un des 16 éléments à l'aide de la relation d'anti-commutation.

Maintenant, par l'argumentation suivante, nous pouvons montrer que les matrices ci-dessus composent effectivement une base complète de l'espace des matrices 4×4 :

- Pour chaque matrice $\Gamma^{(n)} \neq \Gamma^{(S)}$, il existe une matrice $\Gamma^{(m)}$ telle que :

$$\Gamma^{(n)}\Gamma^{(m)} = -\Gamma^{(m)}\Gamma^{(n)}.$$

Cela implique une trace nulle pour $\Gamma^{(n)}$,

$$\pm\left|\Gamma^{(in)}\right| = tr\left|\Gamma^{(n)}(\Gamma^{(m)})^2\right| = -tr\left|\Gamma^{(m)}\Gamma^{(n)}(\Gamma^{(m)})^2\right| = -tr\left|\Gamma^{(n)}(\Gamma^{(m)})^2\right| = 0, \qquad (1.30)$$

Dans l'équation (1.30), la permutation cyclique de la trace a été utilisée.

- Pour chaque $\Gamma^{(a)}$et$\Gamma^{(b)} \neq \Gamma^{(a)}$, il existe $\Gamma^{(n)} \neq \Gamma^{(S)}$, tel que :

$$\Gamma^{(a)}\Gamma^{(b)} = \Gamma^{(n)}.$$

Maintenant, nous supposons qu'ils existent a_n des nombres avec :

$$\sum_n a_n \Gamma^{(n)} = 0. \tag{1.31}$$

En multipliant cette relation par $\Gamma^{(m)}$ et en prenant par la suite la trace on trouve

$$\sum_n a_n \, tr\left|\Gamma^{(in)}\Gamma^{(m)}\right| = 0. \tag{1.32}$$

Dans le cas où $\Gamma^{(m)} \neq \Gamma^{(S)}$ et tenant compte des équations (1.30) et (1.31) on trouve que $a_n = 0$.

D'autre part, si $\Gamma^{(m)} = \Gamma^{(S)}$, on trouve $a_S = 0$. Par conséquent, tous les coefficients dans (1.31) sont nuls. Ce qui prouve que les $\Gamma^{(n)}$ sont linéairement indépendants [5].

Matrices inverses :

Comme pour les quadrivecteurs (plus généralement pour les tenseurs de Lorentz) on peut définir la matrice γ_μ correspondante à γ^μ en abaissant l'indice via :

$$\gamma_\mu = g_{\mu v}\gamma^v. \tag{1.33}$$

Et nous avons :

$$\gamma^\mu\gamma_\mu = \gamma^\mu g_{\mu v}\gamma^v = (\gamma^\mu)^2 g_{\mu v} = g^{\mu\mu}g_{\mu\mu} = 1. \tag{1.34}$$

Cela signifie que γ_μ est la matrice inverse de γ^μ . Donc on obtient généralement la matrice inverse de $\Gamma^{(n)}$ en inversant l'ordre de ses matrices γ^μ, en les remplaçant par γ_μ et en ajoutant un signe à chaque facteur *i*.

Suivant cette procédure, par exemple, la matrice inverse de $(i\,\gamma^1\gamma^2\gamma^3)$ devient $(-i\,\gamma_3\gamma_2\gamma_1)$ [4].

1.3.4 Solutions de l'équation de Dirac pour des particules libres :

La recherche des solutions de l'équation de Dirac pour des particules libres n'est pas aussi évidente que pour le cas de l'équation de Klein-Gordon. Il existe plusieurs méthodes pour trouver les solutions pour des particules libres, la plus

répandue est certainement celle faisant le calcul dans le référentiel dans lequel la particule est au repos. Nous pouvons écrire les quatre solutions sous la forme:

$$\psi^{\mathbf{1}} = e^{-\left(\frac{imc^2}{\hbar}\right)t}\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}, \psi^{\mathbf{2}} = e^{-\left(\frac{imc^2}{\hbar}\right)t}\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}. \tag{1.35}$$

$$\psi^{\mathbf{3}} = e^{+\left(\frac{imc^2}{\hbar}\right)t}\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}, \psi^{4} = e^{+\left(\frac{imc^2}{\hbar}\right)t}\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}. \tag{1.36}$$

Les solutions en ondes planes :

Nous avons vu que la théorie de Dirac satisfait aux exigences de la covariance de Lorentz et que les solutions avec des énergies positives ont une correspondance sensible avec le cas non relativiste [3]. L'hamiltonien de Dirac prend la forme :

$$H = c\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta mc^2. \tag{1.37}$$

Pour de nombreuses applications, il est utile de scinder le spineur à quatre composantes en deux spineurs à deux composantes χ et φ :

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} \; ; \; \varphi = \begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix} \text{et} \chi = \begin{pmatrix}\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix}. \tag{1.38}$$

L'utilisation de la forme explicite des matrices et à l'aide de l'équation (1.9), on obtient :

$$E\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}\\\hat{\sigma} & 0\end{pmatrix}.\vec{p}\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} + m_0c^2\begin{pmatrix}\mathbb{1} & 0\\0 & -\mathbb{1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix}. \tag{1.39}$$

ou bien

$$E\varphi = c\hat{\sigma}.\vec{p}\,\chi + m_0c^2\varphi. \tag{1.40}$$

$$E\chi = c\hat{\sigma}.\vec{p}\varphi - m_0c^2\chi. \tag{1.41}$$

Pour trouver les équations relatives aux ondes planes (φ_0 et χ_0), il suffit de remplacer dans l'équation (1.41) les opérateurs $\vec{p}$ par leurs valeurs propres p :

$$\begin{aligned}(E - m_0c^2)\,\mathbb{1}\,\varphi_0 - c\,\hat{\sigma}.\vec{p}\,\chi_0 = 0,\\ (E - m_0c^2)\,\mathbb{1}\,\chi_0 - c\,\hat{\sigma}.\vec{p}\,\varphi_0 = 0.\end{aligned} \tag{1.42}$$

L'équation (1.42) est un système d'équations linéaires homogènes pour les inconnues φ_0 et χ_0 . Des solutions non triviales n'existent que dans le cas où le déterminant des coefficients est nul :

$$\begin{vmatrix}(E - m_0c^2)\mathbb{1} & -c\,\hat{\sigma}.\vec{p} \\ -c\,\hat{\sigma}.\vec{p} & (E + m_0c^2)\mathbb{1}\end{vmatrix} = E^2 - m_0c^4 - c^2(\hat{\sigma}.\vec{p})(\hat{\sigma}.\vec{p}) = 0. \tag{1.43}$$

En utilisant la relation :

$$(\hat{\sigma}.\vec{A})(\hat{\sigma}.\vec{B}) = \vec{A}.\vec{B}\mathbb{1} + i\hat{\sigma}.(\vec{A}\times\vec{B}). \tag{1.44}$$

On obtient la relation énergie-impulsion relativiste pour des particules libres :

$$E^2 - m_0c^2 - c^2p^2 \Rightarrow \begin{cases}E^{(+)} = +\,c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = +\,cp_0\\ E^{(-)} = -\,c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = -\,cp_0\end{cases}. \tag{1.45}$$

Il suffit d'introduire les expressions de $E^{(+)}$et de $E^{(-)}$dans l'équation (1.41) pour trouver les solutions (non normalisées) :

$$\begin{aligned}E^{(+)}&: \psi^{(+)}(x) = \begin{pmatrix}\chi^{(1,2)}\\ \hat{\sigma}.\vec{p}\chi^{(1,2)}/(p_0 + m_0c)\end{pmatrix} e^{-i(cp_0 - px)/\hbar} \sim \psi_p^{(1.2)}(x).\\ E^{(-)}&: \psi^{(-)}(x) = \begin{pmatrix}-\hat{\sigma}.\vec{p}\chi^{(3,4)}/(p_0 + m_0c)\\ \chi^{(3,4)}\end{pmatrix} e^{i(cp_0 + px)/\hbar} \sim \psi_{-p}^{(3.4)}(x).\end{aligned} \tag{1.46}$$

Où $\chi^{(1,2)}$et $\chi^{(3,4)}$ représentent, respectivement, deux spineurs linéairement indépendants [4].

Chapitre 2

Les systèmes à masses dépendant de la position

2.1 L'hamiltonien généralisé

Beaucoup de recherches ont abordé le sujet de l`hamiltonien généralisé à des systèmes à masse effective dépendant de la position. Ces recherches ont des conséquences directes dans différents domaines de la physique (les semi-conducteurs, la matière condensée, nucléaire …).

Pour un système à masse dépendant de la position, 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.

von Roos [7] a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H = -\frac{\hbar}{4}\left[m^{\alpha}(z)\,\nabla\, m^{\beta}(z)\,\nabla\, m^{\gamma}(z) + m^{\gamma}(z)\,\nabla\, m^{\beta}(z)\,\nabla\, m^{\alpha}(z)\right]. \qquad (2.1)$$

Où α, β, γ sont des paramètres, vérifiant $\alpha + \beta + \gamma = -1$, souvent appelés paramètres d'ambiguïté.

Différentes formes de l'hamiltonien sont employées selon les choix de l'ensemble des paramètres d'ambiguïté. Ainsi Gora et Williams [20] ont choisi $\alpha = -1$, $\beta = \gamma = 0$, Ben Daniel et Duke [6] avait opté pour $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$, Zhu et Kroemer [21] pour $\alpha = \gamma = -1/2$, $\beta = 0$, Li et Kuhn [11] pour $\alpha = 0$, $\beta = \gamma = -1/2$, et enfin très récemment Mustafa et Mazharimousavi [18] ont proposé, $\alpha = \gamma = -1/4$, $\beta = -1/2$.

Le problème est de savoir si on peut arriver à choisir une valeur unique des paramètres α et β, 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 α et β.

Dans ce chapitre, nous allons collecter et résumer les principaux articles qui étudient les 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. Pour toutes ces raisons, nous avons relevé le défi pour offrir un cadre ou un repère dans lequel nous avons mis en ordre les auteurs et les articles les plus pertinents auxquels une personne intéressée par ce domaine ne peut ni les ignorer ni les omettre comme références.

Nous avons opté pour une revue chronologique des apports les plus importants pour la compréhension des propriétés liées à des systèmes à masses dépendant de la position.

2.1.1. Revue historique :

- **D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966)**

Dans cet article [6], le modèle de Bethe-Sommerfeld pour l'effet tunnel d'un électron est pris comme cadre pour l'étude de la pénétration à travers une barrière. En particulier ils ont étudié le cas où la courbure (la masse de l'électron) et le centre de surface des surfaces d'énergie constante d'un électron varient à travers la jonction. En conclusion, ces auteurs préconisent la forme adéquate suivante de l'hamiltonien [6]

$$H_{BDD} = P\,[m(x)]^{-1}\,P/2. \qquad (2.2)$$

- **O. vonRoos (1982)**

Le mouvement des porteurs libres (des électrons et des trous) dans les semi-conducteurs de composition chimique non uniforme est parfois décrit au moyen d'un hamiltonien possédant une masse efficace dépendant de la position. Dans des travaux précédents il a été prouvé que le fait que les masses dépendent de la position mène à des contradictions et ce à cause du théorème de Bargmann, qui postule qu'une superposition logique des états des différentes masses (paquets d'ondes) est interdite. von Roos[7] 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 d'hamiltoniens inégaux issus de la même approximation, tous dérivés de beaucoup de formes d'hamiltoniens de base. Et tant que le concept d'une masse dépendante de la position est maintenu ni l'unicité ni l'invariance galiléenne des hamiltoniens ne sont assurées. Il semble pour l'auteur approprié d'abandonner le concept d'une masse dépendante de la position. Dans ses travaux antérieurs, il a montré comment le faire avec succès. L'importance d'une compréhension théorique des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs avec une composition chimique variable et dépendante de la position pour des dispositifs technologiques modernes n'a plus besoin d'être soulignée. 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 :

$$T = -\frac{\hbar}{4}\left[m^{\alpha}(z)\,\nabla\, m^{\beta}(z)\,\nabla\, m^{\gamma}(z) + m^{\gamma}(z)\,\nabla\, m^{\beta}(z)\,\nabla\, m^{\alpha}(z)\right]. \qquad (2.3)$$

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

Ainsi l'opérateur de T. Gora et F. Williams est obtenu pour $\alpha = -1$ et $\beta = \gamma = 0$, alors que celui de Q.-G. Zhu et H. Kroemer 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 [9].

- **J. Thomsen, G.T. Einevoll, et P.C. Hemmer (1988)**

Ces auteurs [10] ont étudié le problème de l'ordre des opérateurs dans l'hamiltonien à masse effective avec des opérateurs d'énergie cinétique de la forme :

$$\frac{1}{4}\left(m^{\alpha} p m^{\beta} p m^{\gamma} + m^{\gamma} p m^{\beta} p m^{\alpha}\right). \qquad (2.4)$$

tel que $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

Grâce à un modèle exact, ils ont montré d'abord que les divergences n'ont pas lieu que dans le cas : $\alpha = \gamma$ et $\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$. Ils concluent que c'est le seul ensemble universel des paramètres qui donne des résultats uniques.

Dans une autre contribution, ils ont étudié pour des hétérostructures avec interfaces abruptes, le problème de l'ordre des opérateurs dans l'hamiltonien à masse effective avec un opérateur d'énergie cinétique, de la forme :

$$\frac{1}{4}\left(m^{\alpha} p m^{\beta} p m^{\gamma} + m^{\gamma} p m^{\beta} p m^{\alpha}\right) \text{ avec } 2\alpha + \beta = -1 \ . \tag{2.5}$$

En utilisant des calculs exacts sur le modèle des super-réseaux, puits quantiques, et potentiels localisés, ils ont montré que la théorie de la masse effective est applicable lorsque $\alpha = 0$ et $\beta = -1$. Dans tous les cas, la théorie de la masse effective a le statut d'un traitement asymptotiquement exact, sauf pour les réseaux tendus [8].

- **Tsung L. Li and Kelin J. Kuhn (1992)**

Ces chercheurs [11] suggèrent un arrangement simple de permutation pour construire l'hamiltonien hermitique utilisé dans l'équation de la masse effective et qui présente un profil doux qui reflète mieux la réalité que les modèles à hétérojonctions abruptes. L'arrangement de permutation produit les hamiltoniens de Ben Daniel et Duke, et de Zhu et Kroemer. L'hétérojonction est modelée par une fonction erreur, Tsung L. Li et Kelin J. Kuhn ont trouvé que le meilleur choix de l'hamiltonien effectif prend la forme [8] :

$$H_{LK} = p\left[m(x)\right]^{-1} p\left[m(x)\right]^{-1} + \left[m(x)\right]^{-1} p\left[m(x)\right]^{-1} p \ / 4 + V \ . \tag{2.6}$$

- **J.-M. Lévy-Leblond (1995)**

J.-M.Lévy-Leblond [12], a appliqué la notion d'invariance galiléenne instantanée pour montrer que l'idée de la masse effective dépendant de la position est consistante et utile. De plus, cela conduit aux conditions de continuité de la fonction d'onde Ψ et de $(1/m)\Psi'$. Ces résultats sont également proposés dans le cas d'hétérojonctions abruptes dans l'approximation de la fonction enveloppe. Dans un

autre article antérieur, il a traité les problèmes les plus simples, à savoir ceux d'une marche, d'une barrière et d'un réseau en potentiel et en masse. En utilisant des conditions de continuité modifiées, il a mis l'accent sur les caractéristiques nouvelles de ces modèles quantiques élémentaires à potentiels constants par morceaux, généralisés au cas d'une masse dépendant de la position [8].

- **L .Dekar et L .Chetouani et T.F.Hammann (1995)**

Dans cet article sous le titre :"Fonctions de Green, via le formalisme des intégrales de parcours pour des systèmes à potentiels et à masses constants par morceaux ".
L. Dekar, L. Chetouani, et T. F. Hammann[14] ont étudié des systèmes à potentiels et à masses constants par morceaux. Ils ont utilisé le formalisme des intégrales de parcours pour relier, la fonction de Green de systèmes à potentiels et à masses constants par morceaux à celle à masse constante. L'application de ce résultat aux cas d'une marche abrupte et d'une barrière rectangulaire en potentiel et en masse, leurs a permis d'une part, d'extraire de la discontinuité de la fonction de Green, la fonction d'onde, et d'autre part les conditions de continuité à travers la jonction.

- **L. Dekar et L. Chetouani et T. F. Hammann (1998)**

Dans un autre article [15] sous le titre : "Solution exacte de l'équation de Schrödinger déduite de L'hamiltonien effectif pour une marche douce en potentiel et en masse", ils ont abordé un système à potentiel et à masse continûment variables à savoir une marche douce en potentiel et en masse. Ils ont réussi à résoudre exactement, pour ce dernier cas, l'équation de Schrödinger, découlant de l'hamiltonien effectif $H = \frac{1}{2}\, p\, \frac{1}{m}\, p + V$. La fonction d'onde trouvée dépend des fonctions de Heun, qui sont une généralisation des fonctions hypergéométrique de Gauss. Ils ont montré que le comportement, en fonction de l'énergie, du coefficient de transmission est pratiquement similaire à celui du cas d'une marche abrupte en potentiel et en masse. En particulier, le coefficient de transmission tend, quand l'énergie tend vers l'infini, vers la même limite que dans le cas d'une masse en marche abrupte. La valeur de l'énergie, pour laquelle le coefficient de transmission

atteint l'unité, est aussi la même dans les cas d'une masse en marche douce et/ou abrupte.

- **M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventra (1998)**

Dans leur article [13] sous le titre "Une remarque sur la limite de haute énergie du problème de la diffusion avec la masse dépendant de la position", ces deux auteurs sont arrivés à la conclusion que le coefficient de transmission du problème de diffusion définie par l'équation Schrödinger :

$$\left[\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\frac{1}{m(x)}\frac{d}{dx}+E-V(x)\right]\psi(k,x)=0. \tag{2.7}$$

tend vers l'unité quand l'énergie augmente indéfiniment, à la seule condition que la masse entrée dans l'équation de Schrödinger soit une fonction continue. Même si le dernier cas représente la situation courante dans les réalisations pratiques des dispositifs, les progrès de la croissance des hétérostructures et les techniques de jet moléculaire permettent actuellement, de réaliser des interfaces abruptes à différents matériaux [8].

- **L. Dekar, L. Chetouani et T.F. Hammann (1999)**

Dans un troisième article [16] titré : "Fonctions propres de l'hamiltonien généralisé pour une marche douce en potentiel et en masse". L. Dekar, L. Chetouani et T. F. Hammann ont résolu, exactement, l'équation de Schrödinger déduite de l'hamiltonien effectif généralisé

$$H=\frac{1}{4}\left[m^{\alpha}p\,m^{\beta}p\,m^{\gamma}+m^{\gamma}p\,m^{\beta}p\,m^{\alpha}\right]+V \text{ avec } \alpha+\beta+\gamma=-1. \tag{2.8}$$

pour un système à potentiel et à masse continûment variables, à savoir une marche douce en potentiel et en masse. La fonction d'onde trouvée étant valable quelques soient les valeurs des paramètres α et β, elle pourra être utilisée pour l'étude des rôles joués par les différents hamiltoniens possibles dans le problème de la masse effective. En étudiant le cas limite où la marche douce en potentiel et en masse tend

vers une marche abrupte en potentiel et en masse, ils ont montré que les paramètres devaient prendre les valeurs $\alpha = \gamma = 0$, $\beta =$ -1, ce qui suggère que la forme appropriée de l'hamiltonien pour le cas d'une interface abrupte soit $H = \frac{1}{2}\, p\, \frac{1}{m}\, p + V$. Cet hamiltonien implique que les conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une interface abrupte doivent être la continuité de $\psi(x)$ et de $(1/\mathrm{m})\,\psi'(x)$.

- **A. de Souza Dutra et C. A. S. Almeida (2000)**

Dans l'article [17] 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 solvable (potentiel de Morse) et ont conclu que les ordres proposés par Gora et de Williams $(a = \beta = \gamma = 0, \alpha = -1)$ et Ben Daniel et Duke $(a = \alpha = \gamma = 0, \beta = -1)$ devraient 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 $(a = 0, \alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0)$, et celui de Li et de Kuhn $(a = \alpha = 0, \beta = \gamma = -1/2)$ comme étant corrects. En conséquence, ils suggèrent que les conditions de continuité aux frontières de l'hétérojonction obtenue par Zhu et Kroemer sont les plus fiables [8].

- **V. A. Smagley, M. Mojahedi, M. Osinski, (2002).**

L'hamiltonien pour une masse effective dépendant de la position est écrit sous la forme [19]:

$$T = -\left(\frac{\hbar^2}{2}\right) m^{\alpha} \nabla m^{\beta} \nabla m^{\alpha} + V \text{ , où } 2\alpha + \beta = -1. \qquad (2.9)$$

est appliqué au problème d'hétérostructures périodiques avec des interfaces abruptes et une distribution de masse discontinue.

Afin de déterminer l'opérateur le plus approprié, les résultats numériques de l'énergie de la transition des inter-bandes et d'inter-sous-bandes sont comparés aux

données expérimentales pour différents super-réseaux $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ et puits quantiques. L'ordre en relation avec le décalage d'énergie comme une fonction des paramètres structuraux (épaisseur du puits, épaisseur et hauteur de la barrière) y a été étudiée. Il a été constaté que la variation de l'opérateur d'énergie cinétique peut causer un excès de décalage d'énergie de transition de l'ordre de 40 MeV. Le modèle avec $\alpha = 0$ et $\beta = -1$ donne le meilleur accord avec les résultats expérimentaux.

- **O. Mustafa et S. H. Mazharimousavi (2007)**

Ces auteurs [18] ont utilisé la notion d'opérateur pseudo - moment pour aboutir à la conclusion que le "bon ordre fiable" est le choix $(\beta = -1/2, \alpha = \gamma = -1/4)$ [8].

2.2 Nouvelles propriétés des systèmes à masse dépendant de la position :

Afin d'illustrer les nouvelles propriétés des systèmes à masse dépendant de la position, on se propose d'étudier les problèmes de la diffusion d'une particule de masse variable par un potentiel sous forme de marche et d'une barrière rectangulaire.

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

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

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

2.2.1 Marche en potentiel et en masse :

La marche de potentiel permet de décrire divers systèmes physiques en première approximation: la surface d'un métal par exemple. Dans le métal, on peut considérer, en première approximation, que les électrons de conduction sont mis en commun et constituent un gaz d'électrons susceptibles de se déplacer librement. Les électrons restent piégés dans le métal car ils ne possèdent pas une énergie cinétique suffisante pour s'en échapper. La région I de la figure 2.1 représente alors le métal tandis que la région II représente l'extérieur du métal.

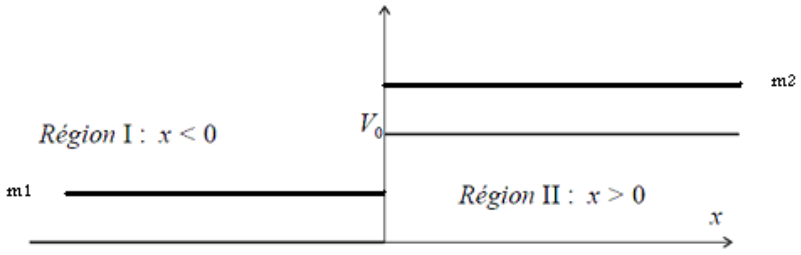


Figure 2.1 : Illustration de la marche en potentiel et en masse.
Région I intérieur du métal, région II l'extérieur du métal.
$x = 0 \equiv$ interface

En résolvant l'équation de Schrödinger généralisée et en optant pour les conditions de continuité : (ψ = continue et $\frac{\psi'}{m}$ = continue ; choix de **Lévy – Leblond**) [12].

On obtient ($k_1 = \sqrt{2m_1E}, v_1 = k_1/m_1$) pour le coefficient de transmission :

$$T = \frac{4v_1v_2}{(v_1 + v_2)}. \qquad (2.10)$$

Et pour le coefficient de réflexion :

$$R = \left(\frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2}\right)^2. \qquad (2.11)$$

Les coefficients de réflexion et de transmission vérifient la relation $R + T = 1$, d'après le principe de conservation de densité du courant de probabilité .

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

$$T_l = \frac{4\sqrt{m_1 m_2}}{(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})^2}. \tag{2.12}$$

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

$$\varepsilon_t : \lim_{E \to \infty} \frac{4\nu_1\nu_2}{(\nu_1 + \nu_2)^2} = 1 \Rightarrow \varepsilon_t = \frac{m_1}{m_1 - m_2} V_0 . \tag{2.13}$$

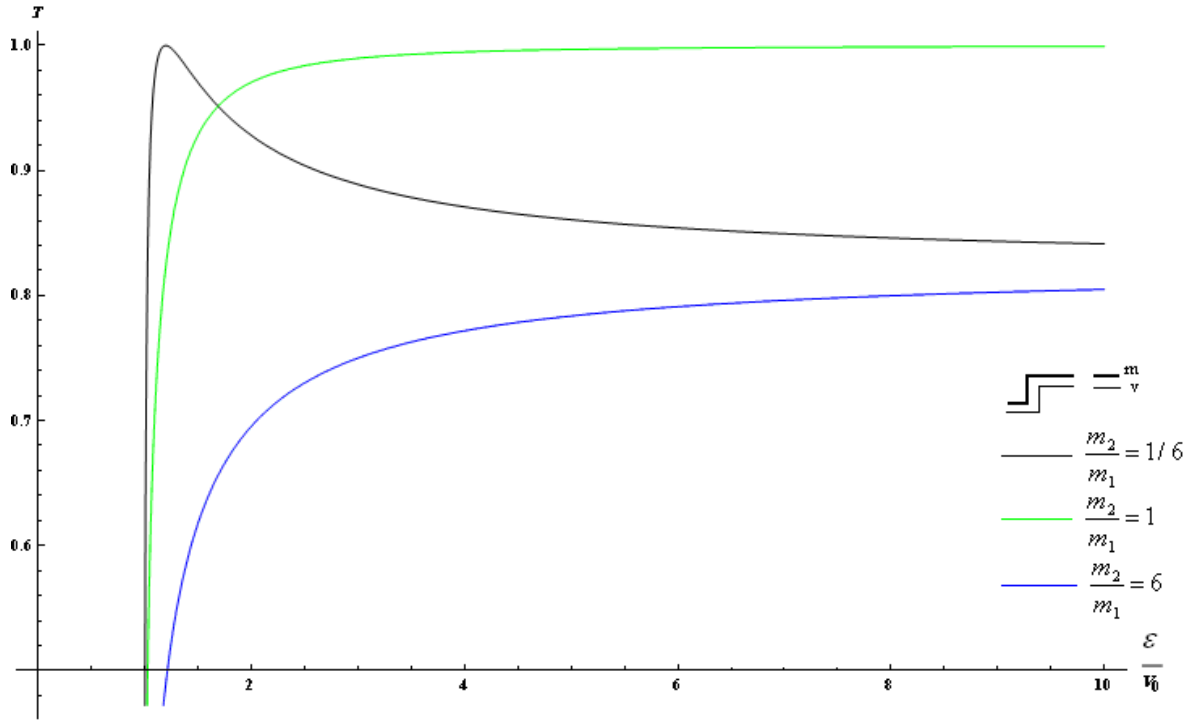


Figure 2.2 : Variation du coefficient de transmission à travers une marche de potentiel en fonction de l'énergie [3].

Pour $m_2/m_1 = 1$:

Lorsque l'énergie augmente, le coefficient de transmission tend asymptotiquement vers l'unité. Ce comportement est physiquement plausible, et est cohérent avec le principe de conservation de la densité du courant de probabilité.

Pour $m_2/m_1 = 1/6$:

A partir de l'énergie $\varepsilon = V_0$ le coefficient de transmission augmente très vite jusqu'à atteindre l'unité pour une énergie $\varepsilon = 6V_0/5$. Puis il diminue doucement jusqu'à la valeur asymptotique $T_l = \frac{4\sqrt{m_1}\sqrt{m_2}}{\left(\sqrt{m_1}+\sqrt{m_2}\right)^2}$ qui est inférieure à l'unité.

Pour $m_2/m_1 = 6$:

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

2.2.2 Barrière rectangulaire en potentiel et en masse

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

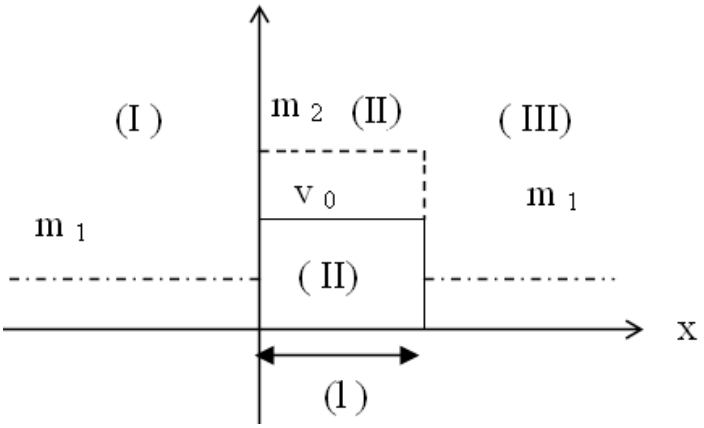


Figure 2.3 : Illustration de la barrière en potentiel et en masse.
Région I et III semiconducteur A, région II semiconducteur B. $X = 0 \equiv$ interface.

En résolvant l'équation de Schrödinger généralisée et en optant pour les conditions de continuité : ($\psi = continue$ et $\frac{\psi'}{m} = continue$; choix de **Lévy – Leblond**) [12]. On obtient ($k_1 = \sqrt{2m_1E}v_1 = k_1/m_1$, $k_2 = \sqrt{2m_1(E-V_0)}v_2 = k_2/m_2$) pour le coefficient de transmission :

$$T = \frac{1}{1+\frac{\left(v_1^2-v_2^2\right)^2}{4(v_1v_2)^2}\,sin^2(k_2l)}. \qquad (2.14)$$

Et le coefficient de réflexion de la barrière :

$$R = \frac{(v_1^2 - v_2^2)^2 sin^2(k_2 l)}{(v_2^2 - v_1^2)^2 \, sin^2(k_2 l) + 4(v_2 v_1)^2}. \qquad (2.15)$$

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

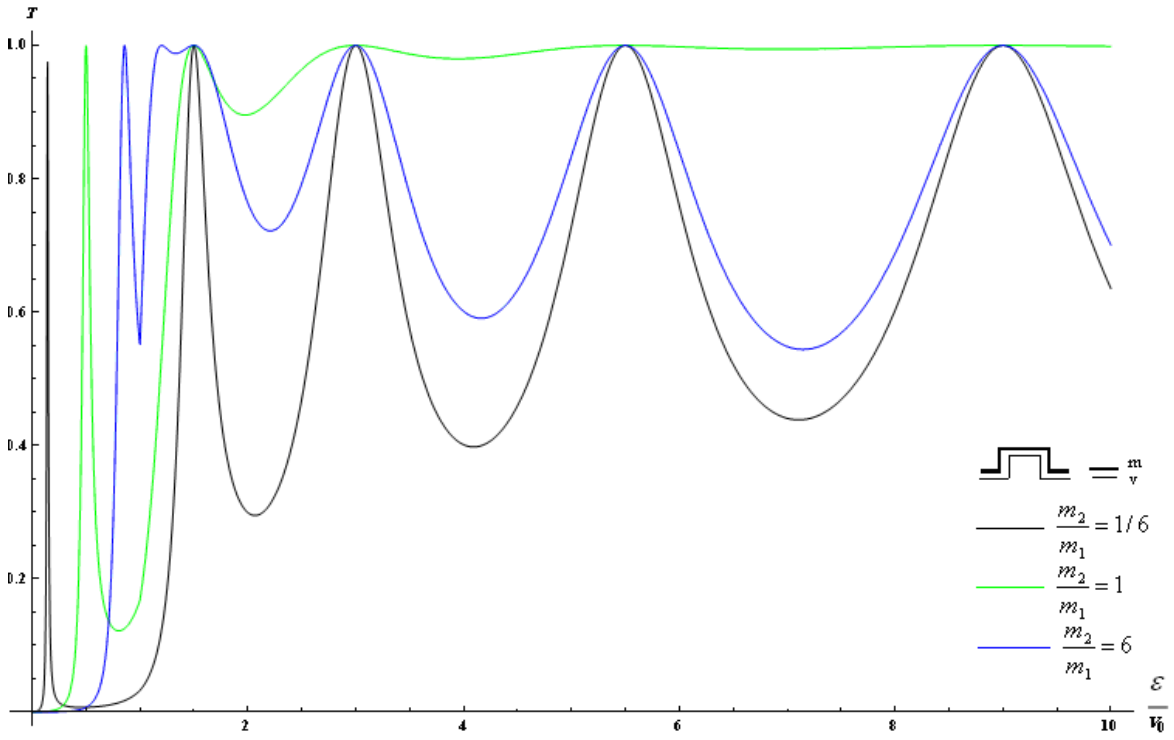


Figure 2.4: Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel et en masse en fonction de l'énergie ; $l = \pi \hbar (m_1 V_0)^{-1/2}$ [8].

Pour $m_2/m_1 = 1$:

Pour $\varepsilon < V_0$, on observe un effet tunnel. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations "amorties" très rapides. Pratiquement la transmission est complète déjà à partir de la valeur $\varepsilon = 3 V_0$.

Pour $m_2/m_1 = 1/6$:

Quand $\varepsilon < V_0$, on observe un effet tunnel. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale et l'unité. Plus l'énergie augmente et plus

les minima du coefficient de transmission augmentent. On retrouve bien l'analogie avec la transmission optique d'un interféromètre de Fabry – Pérot.

Pour $m_2/m_1 = 6$:

Le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale $T_l = \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2}$ et l'unité. Plus l'énergie augmente et plus les minima du coefficient de transmission diminuent. De nouveau cela illustre bien l'analogie avec la transmission optique d'un interféromètre de Fabry – Pérot.

On remarque que l'effet tunnel a lieu pour des énergies faibles inférieures à V_0 d'abord pour le cas $m_2/m_1 = 1/6$ puis pour le cas $m_2/m_1 = 1$, et enfin pour le cas $m_2/m_1 = 6$.

Chapitre 3

Résolution de l'équation de Dirac pour des systèmes à masses dépendantde la position

3.1 Introduction

Nous étudions l'équation de Dirac unidimensionnelle dans le cadre d'une masse dépendant de la position sous l'action d'un potentiel en pointe et d'un potentiel de Woods-Saxon. Pour le premier potentiel, on étudie l'équation de Dirac pour une masse dépendant de la position et on écrit les solutions en terme de fonctions de Whittaker. On trouve ainsi les coefficients de réflexion et de transmission en utilisant les conditions de raccordement sur les fonctions d'onde. Pour le second potentiel, à savoir, celui de de Woods-Saxon, les solutions pour l'équation de Dirac sont, elles, obtenues en terme d'une fonction hypergéométrique, et elle est continue. Toujours pour le second potentiel, nous étudions en particulier le problème de diffusion et nous dérivons les expressions exactes des coefficients de réflexion et de transmission qui sont comparés à ceux du cas d'une masse constante.

3.2 Equation de Dirac avec masse dépendante de la position :

L'équation de Dirac relativiste à particules libres s'écrit [24] :

$$\left[\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m(x)\right]\psi(x) = 0. \tag{3.1}$$

Où nous supposons que la masse de la particule de Dirac ne dépend que d'une coordonnée spatiale x. Sous l'effet d'un potentiel externe $V(x) = eA_0(x)$ (qui est un potentiel électromagnétique) et en prenant les matrices gamma γ_x et γ_0 comme les matrices de Pauli $i\delta_x$et δ_z, respectivement, l'équation de Dirac à une dimension, pour un état stationnaire $\psi(x,t) = e^{-iEt}\psi(x)$, devient :

$$\left\{\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\frac{d}{dx} - [E - V(x)]\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + m(x)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\varphi_1(x)\\ \varphi_2(x)\end{pmatrix} = 0\,. \tag{3.2}$$

où nous avons introduit $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ qui sont décomposées en composantes supérieure et inférieure de la fonction d'onde à deux composantes $\psi(x)$. L'équation (3.2) se transforme en deux équations différentielles couplées :

$$\frac{d\varphi_1(x)}{dx} = -[E - V(x) + m(x)]\varphi_2(x). \tag{3.3}$$

$$\frac{d\varphi_2(x)}{dx} = [E - V(x) + m(x)]\varphi_1(x). \tag{3.4}$$

Afin de simplifier les solutions des équations ci-dessus, nous utilisons deux composantes auxiliaires $\varphi(x)$ et $\chi(x)$ en termes de $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ comme :

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) + i\varphi_2(x). \tag{3.5}$$

$$\chi(x) = \varphi_1(x) - i\varphi_2(x). \tag{3.6}$$

qui mènent à :

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = i[E - V(x)]\varphi(x) - im(x)\chi(x)], \tag{3.7}$$

$$\frac{d\chi(x)}{dx} = -i[E - V(x)]\chi(x) + im(x)\varphi(x)]. \tag{3.8}$$

En éliminant $\chi(x)$ de l'équation (3.7) et l'insertion dans l'équation (3.8) et en suivant une procédure similaire pour $\varphi(x)$, nous obtenons deux équations différentielles découplées du second ordre pour $\varphi(x)$ et $\chi(x)$, respectivement :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \frac{m'}{m}\frac{d\varphi(x)}{dx} + \left\{|E - V(x)|^2 - m^2(x) + i\frac{dV(x)}{dx} + i|E - V(x)|\frac{m'}{m}\right\}\varphi(x) = 0. \tag{3.9}$$

et

$$\frac{d^2\chi(x)}{dx^2} - \frac{m'}{m}\frac{d\chi(x)}{dx} + \left\{|E - V(x)|^2 - m^2(x) - i\frac{dV(x)}{dx} - i|E - V(x)|\frac{m'}{m}\right\}\chi(x) = 0. \tag{3.10}$$

3.3 Cas d'un potentiel en pointe :

On considère que le potentiel en pointe posséde la forme :

$$V(x) = V_0 \left[\theta(-x)e^{\frac{x}{a}} + \theta(x)e^{\frac{-x}{a}}\right]. \tag{3.11}$$

Le paramètre V_0 représente la hauteur de la barrière ou la profondeur du puits en fonction de son signe. α un paramètre réel et positif, et $\theta(x)$ est la fonction marche de Heaviside.

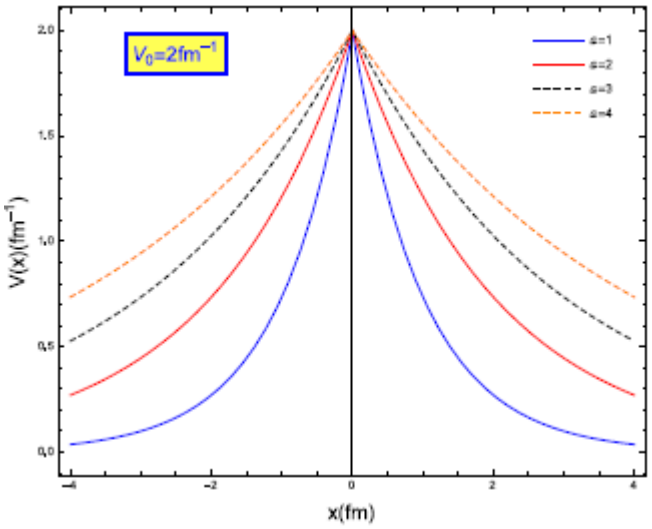


Figure 3.1 : Aspect du potentiel en pointe pour différentes valeurs du paramètre *a* [22].

Nous supposons que la distribution de masse des particules de Dirac ne dépend que de la coordonnée spatiale et obéit à une forme de masse en pointe :

$$m(x) = m_0 + m_1 \left[\theta(-x)e^{\frac{x}{a}} + \theta(x)e^{\frac{-x}{a}}\right]. \tag{3.12}$$

Ici, le paramètre m_0 correspondra à la masse au repos de la particule de Dirac et m_1 est un petit paramètre, réel, positif. À cet égard, la forme de la distribution de

masse nous permet d'obtenir des résultats analytiques pour les coefficients de réflexion et de transmission ainsi que les solutions des états liés de la problématique. D'ailleurs, de l'équation (3.9), il est facile de voir que le rapport de la dérivée de la masse à la masse est proportionnel au paramètre de masse m_1. Donc, afin de simplifier les solutions, nous nous débarrassons des termes qui contiennent la dérivée de la masse dans les équations. (3.9) et (3.10) pour le cas $m_1 \to 0$. Donc, les équations. (3.9) et (3.10) deviennent :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \left\{|E - V(x)|^2 - m^2(x) + i\frac{dV(x)}{dx}\right\}\varphi(x) = 0. \tag{3.13}$$

$$\frac{d^2\,\chi(x)}{dx^2} + \left\{|E - V(x)|^2 - m^2(x) - i\frac{dV(x)}{dx}\right\}\chi(x) = 0. \tag{3.14}$$

3.3.1 Les solutions pour les états de diffusion :

Afin de trouver la diffusion d'une particule de Dirac sous le potentiel en pointe en présence d'une masse effective, il faut connaitre la solution des deux équations différentielles découplées du second ordre (3.9) et (3.10) dans la région positive ($x > 0$) et dans la région négative ($x < 0$). D'autre part, on voit distinctement à partir des équations (3.7) et (3.8) qu'il suffira de résoudre l'une des équations (3.12) ou (3.13) pour obtenir les solutions décrivant les états de diffusion. On va voir les résultats ci-dessous :

A. Solutions dans la région négative : $x < 0$

En insérant la forme de distribution de masse (3.12) et le potentiel en pointe (3.11) dans l'équation. (3.13) et en changeant la variable $y = e^{x/a}$, nous obtenons :

$$\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \frac{1}{y}\frac{d\varphi(y)}{dy} + \left[\alpha^2(V_0^2 - m_1^2) + \frac{\alpha\{iV_0 - 2\alpha(EV_0 + m_0m_1)\}}{y} + \frac{\alpha^2(E^2 - m_0^2}{y^2}\right]\Phi(y) = 0. \tag{3.15}$$

En posant : $\Phi(y) = y^{-1/2}f(y)$ et en la substituant dans l'équation ci-dessus, on obtient une équation différentielle de Whittaker de la forme [22] :

$$f''(z)+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\mu_{1L}}{z}+\frac{\left(\frac{1}{4}-K_{1L}^2\right)}{z^2}\right]f(z)=0. \tag{3.16}$$

où nous avons utilisé la paramétrisation suivante :

$$\begin{cases} z=2\alpha\sqrt{m_1^2-V_{0y}^2}=\beta_{1y} \\ \mu_{1L}=\frac{(i-2\alpha E)V_0+2\alpha m_0 m_1}{2\sqrt{m_1^2-V_{0y}^2}} \\ K_{1L}=\alpha\sqrt{m_0^2-}\,E^2 \end{cases}. \tag{3.17}$$

Par conséquent, l'équation (3.15) admet une solution générale de la forme :

$$\Phi_L(y)=A_1 y^{-1/2}M_{\mu 1L}K_{1L}\left(\frac{y}{\beta_1}\right)+A_2 y^{-1/2}W_{\mu 1L}K_{1L}\left(\frac{y}{\beta_1}\right). \tag{3.18}$$

Où $M_{\mu,k}(z)$ et $W_{\mu,k}(z)$ sont des fonctions de Whittaker définies en termes de fonctions hypergéométriques confluentes de Kummer Met Upar :

$$M_{\mu,k}(z)=z^{k+1/2}\,e^{-x/2}\,M\left(k-\mu+\frac{1}{2},1+2k;z\right). \tag{3.19}$$

$$W_{\mu,k}(z)\;=z^{k+1/2}\,e^{-x/2}\,U\left(k-\mu+\tfrac{1}{2},1+2k;z\right). \tag{3.20}$$

B. Solutions dans la région positive: $x>0$

Afin de trouver les solutions de diffusion pour l'autre extrémité x $>$ 0, nous avons choisi une nouvelle variable $y=\ e^{-x/a}$. Donc, en utilisant, comme dans l'équation (3.15), la transformation $\Phi(y)=y^{-1/2}g(y)$ on obtient aussi une équation différentielle de Whittaker [22] :

$$g''(z)+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\mu_{1R}}{t}+\frac{\left(\frac{1}{4}-K_{1L}^2\right)}{t^2}\right]g(z)=0 \tag{3.21}$$

où le résultat pour les paramètres t, μ_{1R} et, K_{1R} se révèle être :

$$\begin{cases} t = 2\alpha\sqrt{m_1^2 - V_{0y}^2} = \beta_{2y} \\ \mu_{1R} = -\frac{(i-2\alpha E)V_0+2\alpha m_0 m_1}{2\sqrt{m_1^2-V_{0y}^2}}. \\ K_{1R} = \alpha\sqrt{m_0^2 -} E^2 \end{cases} \quad (3.22)$$

Ainsi, l'équation (3.21), dans ce cas, possède la solution générale:

$$\Phi_R(y) = A_3 y^{-1/2} M_{\mu 1R} K_{1R}\left(\frac{y}{\beta_2}\right) + A_4 y^{-1/2} W_{\mu 1R}, K_{1R}\left(\frac{y}{\beta_2}\right). \quad (3.23)$$

Jusqu'à présent, nous avons déduit les expressions analytiques de la fonction d'onde du problème de diffusion qui dépendent de quatre constantes inconnues (A_1,A_2) et (A_3,A_4) respectivement.

3.3.2 Coefficients de réflexion et de transmission :

Afin d'étudier les coefficients de transmission et de réflexion, il faut étudier le comportement asymptotique de la fonction d'onde pour $x \to \pm\infty$. Donc, pour $x > 0$ on a :

$$\Phi_L(x \to -\infty) = A_1 e^{iK_{1Lx}} + A_2 e^{-iK_{1Lx}}. \quad (3.24)$$

Pour l'autre extrémité $x > 0$, nous avons

$$\Phi_R(x \to +\infty) = A_3 e^{iK_{1Rx}}. \quad (3.25)$$

On a aussi la densité de courant électrique pour l'équation de Dirac :

$$j = \frac{1}{2}[|\Phi(x)|^2 - |\chi(x)|^2]. \quad (3.26)$$

L'onde plane venant de la gauche vers la droite on a $A_2 = 0$. Nous devons insérer les équations (3.24) et (3.25) dans l'équation. (3.7) ce qui donne respectivement pour $\chi_L(x)$ et $\chi_R(x)$,

$$\chi_L(x) = \frac{1}{m(x)}\left[(E - K_{1L})A_1 e^{iK_{1L}x} + (E + K_{1L})A_2 e^{-iK_{1L}x}\right], \tag{3.27}$$

$$\chi_R(x) = \left(\frac{E-K_{1R}}{m(x)}\right)A_4 e^{iK_{1R}x}. \tag{3.28}$$

Le courant dans l'équation (3.26) peut être écrit comme $j_L = j_{inc} + j_{refl}$ à la limite $x \to -\infty$

où j_{inc} est le courant incident et j_{refl} est le courant réfléchi.

De même que pour $x \to +\infty$ le courant est $j_R = j_{trns}$ où j_{trns} est le courant transmis.

En insérant les équations (3.24), (3.25), (3.27) et (3.28) dans l'équation (3.26), nous trouvons les coefficients de réflexion et de transmission [22], respectivement, comme :

$$R = \frac{j_{refl}}{j_{inc}} = \frac{(E + K_{1L})|A_2|^2}{(E - K_{1L})|A_1|^2}. \tag{3.29}$$

$$T = \frac{j_{trns}}{j_{inc}} = \frac{|A_4|^2}{|A_1|^2}. \tag{3.30}$$

.

En utilisant les conditions de continuité suivantes sur les fonctions d'onde et leurs premières dérivées en $x = 0$ pour obtenir des expressions explicites de R et T :

$$\begin{cases} \Phi_L(x=0) = \Phi_R(x=0) \\ \dfrac{d\,\Phi_L(x)}{dx}\Big|_{x=0} = \dfrac{d\,\Phi_R(x)}{dx}\Big|_{x=0} \end{cases}. \tag{3.31}$$

En utilisant ces dernières équations avec les équations (3.29) et (3.30), on peut obtenir :

$$A_4F_4 = A_1F_1 + A_2F_2. \tag{3.32}$$
$$A_4H_4 = A_1H + A_2H_2. \tag{3.33}$$

Où $F_1, F_2, F_4, H_1, H_2, H_4$ sont exprimés comme suit:

$$\begin{cases} F_1 = M_{\mu 1L}, K_{1L}\left(\frac{1}{\beta_1}\right). \\ F_2 = W_{\mu 1L}, K_{1L}\left(\frac{1}{\beta_1}\right). \\ F_4 = W_{\mu 1R}, K_{1R}\left(\frac{1}{\beta_2}\right). \\ H_1 = \dfrac{(1-(1+2\mu_{1L})\beta_1)M_{\mu 1L}, K_{1L}\left(\frac{1}{\beta_1}\right) + (1+2(\mu_{1L}+K_{1L}))\beta_1 M_{\mu 1L}, K_{1L}}{2\alpha\beta_1} \\ H_2 = \dfrac{(1-(1+2\mu_{1L})\beta_1)W_{\mu 1L}, K_{1L}\left(\frac{1}{\beta_1}\right) - 2\beta_1 W_{\mu 1L} + 1, K_{1L}\left(\frac{1}{\beta_1}\right)}{2\alpha\beta_1}. \\ H_4 = \dfrac{\left(2\beta_2 W_{\mu 1R} + 1, K_{1R}\left(\frac{1}{\beta_2}\right)\right) + \left((2\mu_{1R}+1)\beta_2 - 1\right)W_{\mu 1R}, K_{1R}\left(\frac{1}{\beta_2}\right)}{2\alpha\beta_2} \end{cases} \tag{3.34}$$

Par conséquent, les coefficients de transmission et de réflexion sont respectivement obtenus comme suit:

$$R = \frac{(E+K_{1L})|F_4H_1 - F_1H_4|^2}{(E-K_{1L})|F_2H_4 - F_4H_2|^2}. \tag{3.35}$$

$$T = \frac{|F_4H_1 - F_1H_4|^2}{|F_2H_4 - F_4H_2|^2}. \tag{3.36}$$

.

3.4 Cas d'un potentiel de Woods-Saxon :

La forme du potentiel de Woods-Saxon (illustré sur la figure 3.2) est donnée par [23]:

$$V(x) = W\left[\frac{\theta(-x)}{e^{-\alpha(x-L)}+1} + \frac{\theta(x)}{e^{\alpha(x-L)}+1}\right]. \tag{3.37}$$

Où W est un paramètre positif dans le problème de diffusion (barrière de potentiel) et négatif dans le problème d'états liés (puits de potentiel); α et L sont deux paramètres réels et positifs.

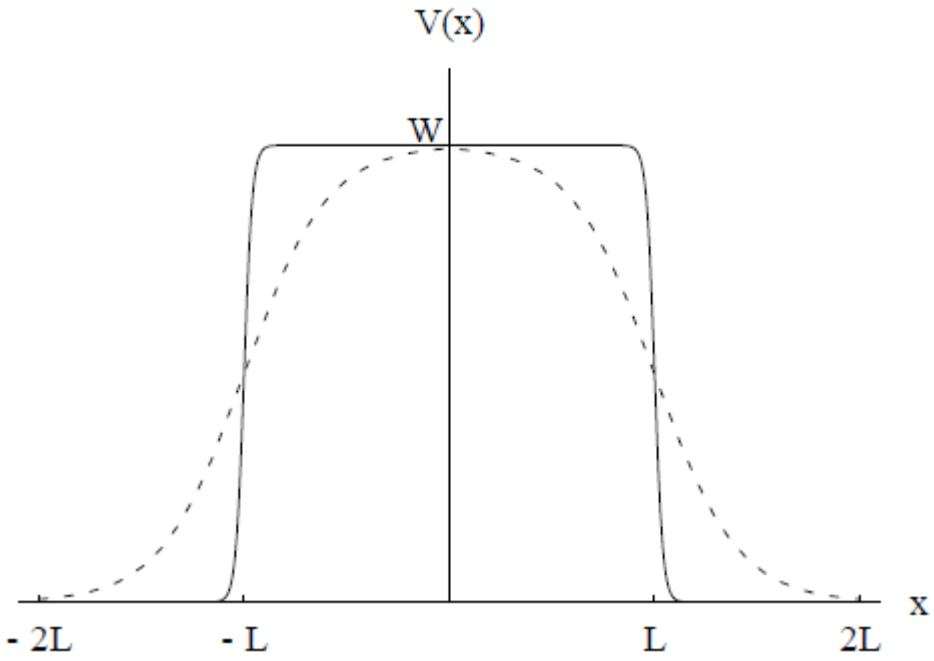


Figure 3.2 : La barrière de potentiel de Woods-Saxon pour $L = 10$ avec $\alpha = 5$ (ligne pleine) et $\alpha = 0.5$ (ligne pointillée) [24].

3.4.1. Problème de diffusion de Dirac avec masse effective :

A. Solution dans la région négative ($x < 0$) :

En utilisant la variable $y = -e^{-\alpha(x+L)}$ et la transformation $\Phi(y) = y^{\mu}(1-y)^{-\lambda}f(y)$ nous montrerons qu'il est possible d'obtenir une solution exacte sous la forme d'une fonction hypergéométrique en imposant des contraintes appropriées à la fonction de masse.

Avec la transformation ci-dessus et en utilisant l'équation (3.9), l'équation (3.10) devient :

$$\begin{aligned} y(1-y)\frac{d^2f(y)}{dy^2} + [1+2\mu - y(1+2\mu-2\lambda)]\frac{df(y)}{dy} \\ + \Big\{\lambda(1+2\mu) \\ + \quad \frac{1}{y(1-y)}\Big[\mu^2(1-y)^2 + \lambda(1+\lambda)y^2 \\ + \frac{1}{\alpha^2}[(E^2+m^2)(1-y)^2 + W^2 - 2EW(1-y) - i\alpha y W]\Big]\Big\} f(y) \\ - \frac{\dot{m}}{m}y(1-y)\Big[\frac{\mu}{y} + \frac{\lambda}{1-y} + \frac{i}{\alpha y}(E - \frac{W}{1-y}\Big] f(y) = 0. \end{aligned} \tag{3.38}$$

Ici et dans ce qui suit, le point indique la dérivation par rapport à la variable transformée ($\dot{m} = dm/dy$).

Afin de conserver la structure de l'équation différentielle hypergéométrique : ${}_2F_1(\alpha,\beta,\gamma;x)$ telle qu'elle est écrite sous la forme [25] :

$${}_2F_1(\alpha,\beta,\gamma;x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)..(\alpha+n-1)\beta(\beta+1)..(\beta+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+n-1)}\frac{x^n}{n!}, [|x|<1]. \tag{3.39}$$

Nous imposons la condition suivante à ce terme :

$$-\frac{\dot{m}}{m}y(1-y) = \alpha + \beta y. \tag{3.40}$$

Qui a la solution suivante (m_0 étant une constante d'intégration):

$$m(y) = m_0\frac{|y-1|^{\alpha+\beta}}{|y|^{\alpha}}. \tag{3.41}$$

Avec ce choix de la fonction de masse l'équation (3.39) devient:

$$y(1-y)\frac{d^2f(y)}{dy^2}+[1+2\mu-y(1+2\mu-2\lambda)+(\alpha+\beta y)]\frac{df(y)}{dy}$$
$$+\Big\{\lambda(1+2\mu)$$
$$+\frac{1}{y(1-y)}\Big[\mu^2(1-y)^2+\lambda(1+\lambda)y^2$$
$$+\frac{1}{\alpha^2}[(E^2-m^2)(1-y)^2+W^2-2EW(1-y)-i\alpha yW]$$
$$+\ (\alpha+\beta y)[\mu(1-y)+\lambda y+\frac{i}{y}(E(1-y)-W]\Big]\Big\}f(y)=0, \tag{3.42}$$

Pour que l'équation. (3.42) conserve la structure de l'équation différentielle hypergéométrique comme dans le cas $m=const$, nous pouvons imposer les conditions suivantes à la fonction de masse:

$$\lim_{y\to-\infty} m(y)=m_0, \tag{3.43}$$

$$m^2(1-y)^2=m_0^2y^2. \tag{3.44}$$

À partir de ces conditions, on fixe complètement les deux paramètres à $\alpha=1$ et $\beta=0$ de sorte que la fonction de masse (dans la région $y\leq 0$) devient :

$$m(y)=m_0\frac{y}{y-1}. \tag{3.45}$$

La condition la plus générale que l'on puisse imposer au terme multipliant $1/[y(1-y)]$ pour que l'équation soit celle de la fonction hypergéométrique est qu'il soit égal à une constante γ. Par conséquent, nous obtenons trois équations :

$$\mu^2+\frac{E^2}{\alpha^2}+\frac{W^2}{\alpha^2}-2\frac{EW}{\alpha^2}-\mu-\frac{i}{\alpha}(E-W)=0 \tag{3.46a}$$

$$-2\frac{E^2}{\alpha^2}+2\frac{EW}{\alpha^2}-i\frac{W-E}{\alpha}-2\mu^2-(\lambda-\mu)=\gamma. \tag{3.46b}$$

$$\mu^2+\lambda(\lambda+1)+\frac{E^2+m_0^2}{\alpha^2}=-\gamma\,. \tag{3.46c}$$

À partir de l'équation. (3.46a), il est possible de la résoudre pour μ alors que λ est trouvé en sommant. (3.46b) et l'équation. (3.46c). On obtient finalement:

$$\lambda = i\sqrt{\frac{W^2 - m_0^2}{\alpha^2}}. \tag{3.47a}$$

$$\mu = -i\left(\frac{E - W}{\alpha}\right). \tag{3.47b}$$

$$\gamma = v^2 - \mu^2 - \lambda(\lambda + 1). \tag{3.47c}$$

Ayant défini $v = ik/a$ où $k^2 = E^2 - m_0^2$. Notre équation. (3.42) devient l'équation différentielle de la fonction hypergéométrique :

$$y(1-y)\frac{d^2f(y)}{dy^2} + [2\mu - (1 + 2\mu - 2\lambda)y]\frac{df(y)}{dy} - (\mu - \lambda - v)(\mu - \lambda + v)f = 0. \tag{3.48}$$

Et la solution générale est (avec les constantes D_1 etD_2) :

$$f(y) = D_1\ {}_2F_1(\mu - v - \lambda, \mu + v - \lambda) + D_2\ y^{1-2\mu}F_1(1 - \mu - v - \lambda, 1 - \mu + v - \lambda; 2 - 2\mu; y). \tag{3.49}$$

B. Solution dans la région positive ($x > 0$) :

Étudions l'autre région dans laquelle $x > 0$, à partir de l'équation (3.9) et en utilisant la variable $z^{-1} = 1 + e^{a(x-L)}$ et la transformation $\Phi(z) = z^{-\omega}(1-z)^{-\rho}g(z)$ [23], on obtient:

$$z(1-z)\,d^2g(z)/dz^2 + [1+2\omega - z(2-2\rho-2\omega) - \dot{m}/mz(1-z)\,]\,dg(z)/dz + \{2\omega(1-\rho) - \dot{m}/mz(1-z)[-\omega/z + \rho/(1-z)] + 1/(z(1-z))[\omega(\omega+1)\,(1+z)^2 + \rho(1+\rho)\,z^2 - \omega(1+z) + z\rho - (2z^2)\rho + 1/\alpha^2[(E-Wz)^2 + m^2(z) - iaWz(1-z) - ia[(E-Wz)\,m'/mz(1-z)]]\}g(z) = 0. \quad (3.50)$$

En suivant la technique similaire à celle exposée dans la précédente sous-section, nous obtenons la fonction de masse :

$$m(z) = m_0(1-z). \quad (3.51)$$

Le résultat final pour les paramètres ω, ρ et δ (le coefficient introduit exigeant que le terme multipliant le facteur $1/[z(1-z)]$ soit une constante) se révèle être:

$$\rho = -i\frac{(E-W)}{a} = \mu\,. \quad (3.52a)$$

$$\omega = i\sqrt{\frac{E^2-m_0^2}{a^2}} = i\frac{k}{a} = v. \quad (3.52b)$$

$$\delta = \lambda^2 - \mu^2 - v^2 - 2v. \quad (3.52c)$$

L'équation différentielle de la fonction $g(z)$ dans l'équation (3.50) devient:

$$(1-z)\frac{d^2g(z)}{dz^2} + [1-2\omega - z(1-2\rho-2\omega)]\frac{dg(z)}{dz} - (-\rho-\omega-\lambda)(-\rho-\omega+\lambda)g(z) = 0. \quad (3.53)$$

avec la solution générale (d_1 et d_2 étant des constantes):

$$g(z) = d_1\,{}_2F_1(-\rho - v - \lambda, -\rho - v + \lambda; 1 - 2v; z) + d_2 z^{2v}\,{}_2F_1(-\rho + v - \lambda, -\rho + v + \lambda; 1 + 2v; z). \quad (3.54)$$

Commentons brièvement le changement des variables choisies dans la région négative $x \in [-\infty, 0] : y = -e^{-a(x+L)}$ et dans la région positive $x \in [0, +\infty] : z^{-1} = 1 + e^{a(x-L)}$. Cela implique clairement que $y \in [-\infty, -e^{-aL}]$ et $y \in [(1 + e^{-aL})^{-1}, 0]$ (qui se réduisent à $y \in [-\infty, 0]$et $z \in [1,0]$ avec l'hypothèse $\gg 1$).

On pourrait craindre que le choix dans la région négative ne soit pas approprié car alors la série hypergéométrique : ${}_2F_1(a, b, c; y)$ ne serait pas convergente car son rayon de convergence est $|y| < 1$. Cependant nous voulons souligner que (dans la région négative) nous n'utilisons la forme explicite de la série hypergéométrique qu'au voisinage de $x \to 0^-(\,|y| \ll 1)$ (dans le problème de diffusion) restant bien dans le rayon de convergence ($|y| < 1$). Lorsque nous obtenons l'expression asymptotique en $x \to -\infty\,(y \to -\infty)$ nous utilisons l'expansion asymptotique de la série hypergéométrique donnée dans l'équation (3.49). Dans la région positive, le développementen $x \to 0^+(\,y \to 1^-)$ et pour éviter les problèmes de convergence, nous utilisons l'identité de continuation dela fonction hypergéométrique. Nous pouvons dire que notre solution exacte ne repose pas du tout sur la série hypergéométriquemais plutôt sur les propriétés de l'équation différentielle satisfaite par : ${}_2F_1(a, b, c; y)$. Si on a besoin d'utiliser la fonction hypergéométrique en dehors du rayon de convergence de la série il faut utiliser des identités deprolongement analytique adéquates. Nous nous attendons en tout cas à ce que l'utilisation d'autres transformations comme par exemple $y = e^{ax}\ et\ z = e^{-ax}$ n'altère finalement pas nos conclusions [23].

3.4.2 Coefficients de réflexion et de transmission :

On peut se demander si l'équation de Dirac avec une masse dépendante de la position a toujours un courant conservé. Il est bien connu qu'une équation de

continuité pour le courant est liée à la conservation de la probabilité, ou de l'unitarité. Il est assez simple de montrer que la dépendance de la masse en fonction de la position n'apporte aucun changement dans la dérivation du courant conservé.

Ceci est lié au fait que la masse multiplie la fonction d'onde du spineur et en dérivant le courant conservé ces termes s'annulent simplement comme dans le cas de la masse constante. La densité de courant de probabilité est donnée par :

$$J(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_x\psi(x) = i[\varphi_1^*(x)\varphi_2(x) - \varphi_2^*(x)\varphi_1(x)]. \tag{3.55}$$

Qui peut également être donnée en termes des fonctions auxiliaires Φ et χ :

$$J(x) = \frac{1}{2}[|\Phi(\mathrm{x})|^2 - |\chi(\mathrm{x})|^2]. \tag{3.56}$$

Avec la forme asymptotique de la fonction d'onde, nous pouvons calculer la densité de courant à gauche $(x < 0)$ J_L, et à droite J_R $(x > 0)$:

$$J_L = J_{inc} - J_{refl} = |H|^2 \frac{k(E-k)}{m_0^2} - |G|^2 \frac{k(E+k)}{m_0^2}. \tag{3.57}$$

,

$$J_R = J_{trans} = |d_1|^2 \frac{k(E-k)}{m_0^2}. \tag{3.58}$$

.

Et nous pouvons définir les coefficients de transmission et de réflexion :

$$T = \frac{J_{trans}}{J_{inc}} = \frac{|d_1|^2}{|H|^2}. \tag{3.59}$$

$$R = \frac{J_{refl}}{J_{inc}} = \frac{(E+k)}{(E-K)}\frac{|G|^2}{|H|^2}. \tag{3.60}$$

On a :

$$A = \frac{\Gamma(2\mu)\Gamma(2v)}{\Gamma(\mu+v-\lambda)\Gamma(\mu+v+\lambda)}.$$

$$B = \frac{\Gamma(2\mu)\Gamma(-2v)}{\Gamma(\mu-v-\lambda)\Gamma(\mu-v+\lambda)}.$$

$$C = \frac{\Gamma(2-2\mu)\Gamma(2v)}{\Gamma(1-\mu+v-\lambda)\Gamma(1-\mu+v+\lambda)}.$$

$$D = \frac{\Gamma(2-2\mu)\Gamma(2v)}{\Gamma(1-\mu-v-\lambda)\Gamma(1-\mu-v+\lambda)}.$$

$$D_1 = \frac{d_1 e^{-i\pi\mu}}{1-2\mu}[M(1-2\mu)e^{2a\mu L} + 2Ne^{-aL}]. \tag{3.61}$$

$$D_2 = \frac{d_1 e^{i\pi\mu}}{1-2\mu}[(1+2\mu)Ne^{-2\mu aL}].$$

$$M = \frac{\Gamma(1+2\mu)\Gamma(1-2v)}{\Gamma(1+\mu-v+\lambda)\Gamma(1+\mu-v-\lambda)}.$$

$$N = \frac{\Gamma(+1-2\mu)\Gamma(1-2v)}{\Gamma(-\mu-v-\lambda)\Gamma(-\mu-v+\lambda)}.$$

$$G = D_1 A e^{i\pi\mu} + D_2 C e^{-i\pi\mu}.$$

$$H = D_1 B e^{i\pi\mu} - D_2 D e^{-i\pi\mu}.$$

Avec la conservation du courant $\partial_x J(x) = 0$, il s'ensuit :

$\int_{-\infty}^{+\infty} \partial_x J(x) = |J(x)|_{-\infty}^{+\infty} = J_R - J_L = 0$ et donc $J_L = J_R$ à partir de laquelle on a la condition d'unitarité $R + T = 1$. Les coefficients de transmission de réflexion peuvent alors être écrits comme suit:

$$T = \frac{|1-2\mu|^2}{|MB(1-2\mu)e^{2\mu aL} + N[B(2-2\mu)e^{(1-2\mu)aL} - D(2\mu+1)e^{-2\mu aL}]|^2}. \tag{3.62}$$

$$R = \frac{E+k|A[M(1-2\mu)e^{2\mu aL} + N(2-2\mu)e^{-aL}] - C[N(2\mu+1)e^{-2\mu aL}]|^2}{E+k|B[M(1-2\mu)e^{2\mu aL} + N[B(2-2\mu)e^{-aL}] - D[N(2\mu+1)e^{-2\mu aL}]|^2}. \tag{3.63}$$

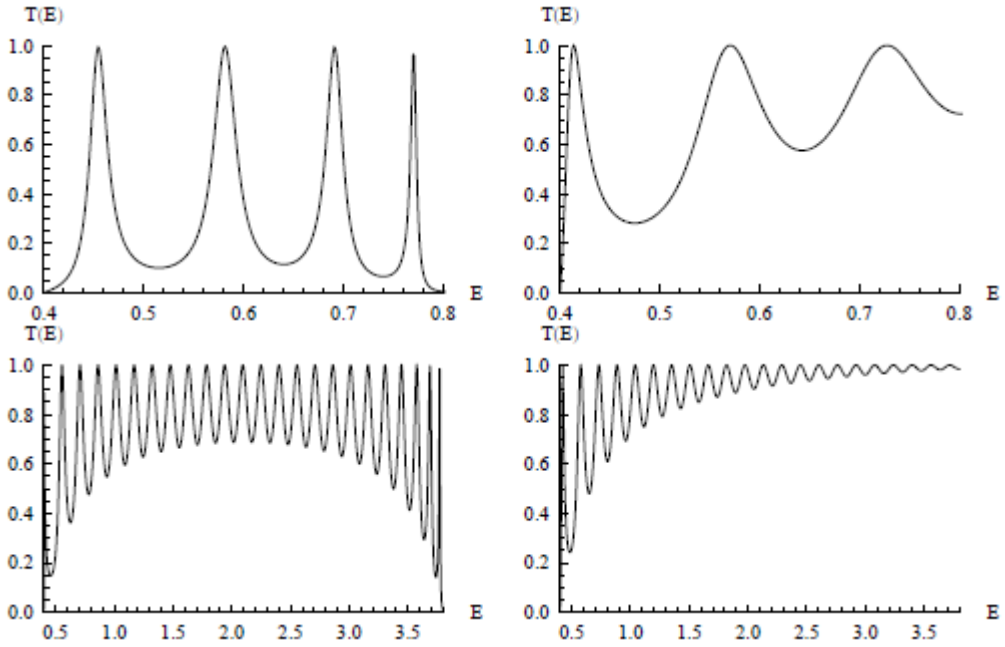


Figure 3.3 : À gauche, le coefficient de transmission dans le cas d'une masse constante. À droite: tracé du coefficient de transmission dans le cas d'une masse dépendant de la position. Paramètres: $\alpha = 5$, $L = 10$. Les graphiques supérieurs correspondent à $W = 1.2$ et inférieurs pour $W = 4.2$ [23].

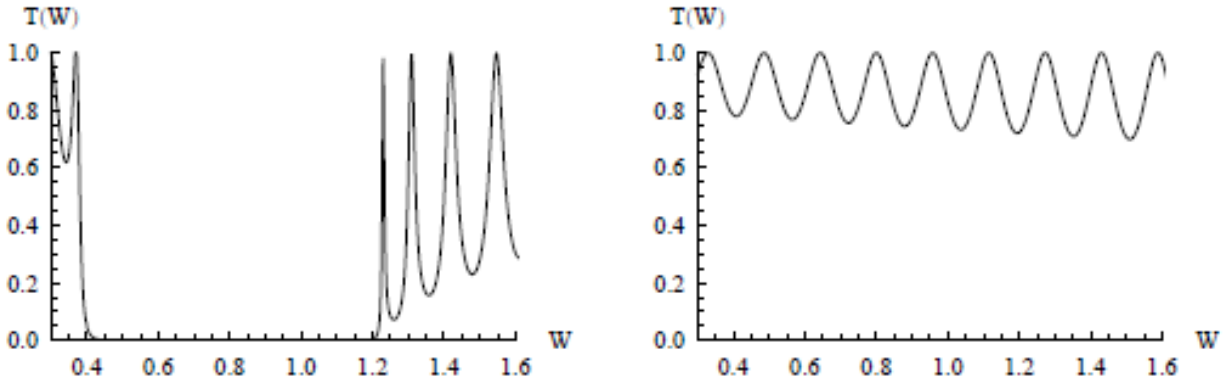


Figure 3.4 : Le coefficient de transmission en fonction de la hauteur de la barrière W. À gauche : dans le cas d'une masse constante. À droite : le cas d'une masse dépendant de la position. Paramètres: $\alpha = 5$, $L = 10$, $m_0 = 0.4$ *et* $E = 2m_0$ [23].

La figure 3.3 illustre le coefficient de transmission dans les cas d'une masse constante (tracé de gauche) et d'une masse dépendante de la position (tracé de droite) pour deux choix des paramètres $(a,\ L)$ et dans ce qui est appelée l'intervalle de Klein $m < E < W - m$.

On note que dans le cas PDM on observe toujours les résonances de transmission trouvées pour une masse constante. On observe que, tandis que pour $m = m_0$ lorsque $E \to W - m, T \to 0$, dans le cas PDM $T \to 1$. C'est un fait important qu'il convient de souligner. Sur la figure 3.4, le coefficient de transmission est tracé en fonction de la hauteur de la barrière W. On note que contrairement au cas de masse constante où $T = 0$ pour $E - m < W < E + m$, dans le cas de masse dépendant de la position, $T\ (W)$ oscille toujours et ne passe pas par zéro dans l'intervalle $E - m < W < E + m$.

3.5 Conclusion :

Nous avons traité le problème de la diffusion pour l'équation de Dirac unidimensionnelle en présence du potentiel en pointe et du potentiel de Woods-Saxon dans le formalisme de la masse dépendante de la position.

Nous avons d'abord déduit de l'équation de Dirac des équations différentielles couplées compliquées régissant les composantes de la fonction d'onde. En introduisant deux composantes auxiliaires on a été amené à avoir des équations différentielles plus simples pour les composantes. Ainsi pour le potentiel en pointe, les fonctions d'onde s'expriment en termes de fonctions hypergéométriques confluentes de Kummer. Et pour le potentiel de Woods-Saxon les solutions dépendent de fonctions hypergéométriques.

L'étude du comportement asymptotique des fonctions d'onde nous a permis de déduire les coefficients de réflexion et de transmission pour ces deux potentiels.

Afin de comparer les nouvelles allures de ces coefficients pour le cas PDM relativement au cas classique d'une masse constante, nous avons tracé les courbes des coefficients de transmission T et de réflexion R pour le potentiel de Woods-Saxon en fonction de l'énergie E de la particule d'une part, et en fonction de la hauteur de la barrière W, d'autre part.

Quand T varie en fonction de l'énergie, on a noté que dans le cas PDM on observe toujours les résonances de transmission trouvées pour une masse constante. Et lorsque T est fonction de la hauteur de la barrière W , on observe que, tandis que pour $m = m_0$ lorsque $E \to W - m$, $T \to 0$, dans le cas PDM $T \to 1$. C'est un fait important qu'il convient de souligner. On a aussi remarqué que $T(W)$ oscille toujours et ne passe pas par zéro dans l'intervalle de Klein ($E - m < W < E + m$) contrairement au cas d'une masse constante où $T = 0$ dans cet intervalle.

Conclusion générale

Conclusion générale

Notre mémoire s'intéresse à la résolution de l'équation de Dirac généralisée des systèmes à masses dépendant de la position.

Nous avons abordé les équations de Schrödinger et de Klein-Gordon en général et l'équation de Dirac en détail. Nous avons rappelé : la formulation canonique, la covariance de Lorentz, les matrices $\boldsymbol{\gamma}$ de Dirac, la construction de formes bilinéaires covariantes et les solutions des particules libres et en ondes planes.

Puis, nous donnons une revue historique sur les travaux les plus importants réalisés par les auteurs et les nouvelles propriétés des systèmes à masse dépendant de la position (marche et aussi barrière rectangulaire en potentiel et en masse).

Nous avons traité le problème de la diffusion pour l'équation de Dirac unidimensionnelle en présence du potentiel en pointe et du potentiel de Woods-Saxon dans le formalisme de la masse dépendante de la position.

Les fonctions d'onde s'expriment en termes de fonctions hypergéométriques confluentes de Kummer pour le potentiel en pointe. Et pour le potentiel de Woods-Saxon les solutions dépendent de fonctions hypergéométriques.

Le comportement asymptotique quand l'énergie tend vers l'infini nous a permis de déduire les coefficients de transmission T et de réflexion R pour les deux potentiels en question.

Afin de comparer les nouvelles allures du coefficient de transmission pour le cas PDM relativement au cas classique d'une masse constante, nous l'avons tracé pour le cas du potentiel de Woods-Saxon en fonction de l'énergie E de la particule d'une part, et en fonction de la hauteur de la barrière W, d'autre part.

On a observé que quand T varie en fonction de l'énergie, on retrouve des résonances de transmission dans le cas PDM analogues au cas d'une masse constante. Et lorsque T est fonction de la hauteur de la barrière W , on observe que lorsque $E \to W - m$, $T \to 1$ dans le cas PDM que, contrairement au cas d'une masse constante où $T \to 0$. On a aussi remarqué que $T(W)$ pour le cas PDM oscille toujours et ne passe pas par zéro dans l'intervalle de Klein ($E - m < W < E + m$) par opposition au cas d'une masse constante où $T = 0$ dans cet intervalle.

Appendice

Appendice :

Fonction (factorielle) gamma

L'intégrale d'Euler

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t}\, dt$$

Factoriel et Π notations

$$\Pi(z) = z! = \Gamma(z+1)$$

Valeurs de nombre entier

$$\Gamma(n+1) = 1.2.3.....(n-1)\, n = n!$$

Formule de réflexion

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = -z\,\Gamma(-z)\Gamma(z) = \pi \cos \pi z$$

Formules asymptotiques

$$\Gamma(az+b) \sim \sqrt{2\pi}\, e^{-az}\, (az)^{az+b-1/2} \qquad (|\arg z| < \pi, a > 0)$$

Équation de type hypergéométrique :

La solution de l'équation différentielle suivante :

$$x(1-x)\frac{d^2u}{dx^2} + [\gamma - (\alpha+\beta+1)x]\frac{du}{dx} - \alpha\beta u = 0$$

C'est une fonction hypergéométrique écrite sous la forme:

$${}_2F_1(\alpha,\beta,\gamma;x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)..(\alpha+n-1)\beta(\beta+1)..(\beta+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)}\frac{x^n}{n!}, [|x|<1].$$

La solution en série entière :

$$ {}_2F_1(\alpha,\beta,\gamma;x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n $$

Les coefficients a_n(en posant $a_0 = 1$)

$$ \frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{(n+a)(n+\beta)}{(n+\gamma)(n+1)} $$

La formule de la dérivée :

$$ \frac{d\ {}_2F_1(\alpha,\beta,\gamma;x)}{dx} = \frac{\alpha\beta}{\gamma}\ {}_2F_1(\alpha+1,\beta+1,\gamma+1;x) $$

Fonctions de Kummer et de Whittaker :

Equation deKummer :

$$ z\frac{d^2w(z)}{dz^2} + (b-z)\frac{dw}{dz} - aw = 0 $$

Fonction de Kummer :

$$ M(a,b,z) = 1 + \frac{az}{b} + \frac{(a)_2 z^2}{(b)_2 2!} + \cdots + \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} + \cdots $$

Tel que

$$ (a)_n = a(a+1)(a+2)\ldots(a+n-1), (a)_0 = 1 $$

Et

$$U(a,b,z)=\frac{\pi}{\sin(\pi b)}\left\{\frac{M(a,b,z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)}-z^{1-b}\frac{M(1+a-b,2-b,z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)}\right\}$$

Equation de Whittaker :

$$\frac{d^2w(z)}{dz^2}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{k}{z}+\frac{\left(\frac{1}{4}-\mu^2\right)}{z^2}\right]w(z)=0$$

Fonction de Whittaker en termes de fonctions hypergéométriques

$$M_{\mu,k}(z)=z^{k+\frac{1}{2}}e^{\frac{-x}{2}}M\left(k-\mu+\frac{1}{2},1+2k;z\right),$$

$$w_{\mu,k}(z)=z^{k+\frac{1}{2}}e^{\frac{-x}{2}}U\left(k-\mu+\frac{1}{2},1+2k;z\right),$$

La forme générale de l'équation :

$$w''+\left[\frac{2A}{Z}+2f'+\frac{bh'}{h}-h'-\frac{h''}{h'}\right]w'+\left[\left(\frac{bh'}{h}-h'-\frac{h''}{h'}\right)\left(\frac{A}{Z}+f'\right)+\frac{A(A-1)}{Z^2}+\frac{2Af'}{Z}+f''+f'^2-\frac{ah'^2}{h}\right]w=0$$

La solution de la forme générale :

$$Z^{-A}e^{-f(Z)}M(a,b;h(Z))$$

$$Z^{-A}e^{-f(Z)}U(a,b;h(Z))$$

Bibliographie

[1] Boussaid K. ,Daouadji A. , " *Résolution de l'équation de Klein-Gordon généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position par la méthode de Nikiforov-Uvarov.* " Mémoire de Master, Université de Médéa Algérie, (2017).

[2] Aioula Kh., "*La solution exacte de l'équation de Dirac avec un potentiel déformé*. "mémoire de master Université de Médéa Algérie, (2019).

[3] Khiyer M., Morsli A., "*Équation de Dirac appliquée à des systèmes à masses dépendant de la position dans un champ coulombien.*" mémoire de master Université de Médéa Algérie, (2015).

[4] Wachter A., "*Relativistic Quantum Mechanics*.", Theoretical and Mathematical Physics Collection, Springer, (2011).

[5] Greiner W., "*Relativistic Quantum Mechanics : wave equation*.", Springer, (2000).

[6] D.J. Ben Daniel, C.B. Duke, "*Space-Charge Effects on Electron Tunneling*", Phys. Rev. 152, 683–692 (1966).

[7] O. von Roos, "*Position-dependent effective masses in semiconductor theory*", Phys. Rev. B27, 7547–7552 (1983).

[8] Bouferrache K., "*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).

[9] Langueur O., "*Résolution de l'équation de Schrödinger pour une double barrière trapézoïdale en potentiel et en masse*", mémoire de Magister, Université de Médéa, (2013).

[10] J. Thomsen, G. T. Einevoll and P. C. Hemmer, "*Operator ordering in effective-mass theory*", Phys. Rev. B39, 12 783-12 788(1989).

[11] T. Li, K. J. Kuhn, "*Band-offset ratio dependence on the effective-mass Hamiltonian based on a modified profile of the GaAs-Al$_x$Ga$_{1-x}$As quantum well*", Phys. Rev. B47,12760–12770 (1993).

[12] J. M. Lévy-Leblond, "*Position-dependent effective mass and Galilean invariance*", Phys. Rev. A52, 1845-1849(1995).

[13] M. Sassoli de Bianchi and M. Di Ventra, "*On remark on the high-energy limit of the One dimensional scattering problem with position dependent mass*", Solid State Communications, Vol 106; N°5, *249-251* (1998).

[14] L. Chetouani, L. Dekar and T. F. Hammann, "*Green's functions via path integrals for systems with position-dependent masses*", Phys. Rev. A52, 82 (1995).

[15] L. Dekar, L. Chetouani and T. F. Hammann, "*An exactly soluble Schrödinger equation with smooth position-dependent mass*", J. Math. Phys. 39, 2551-2563 (1998).

[16] L. Dekar, L. Chetouani and T. F. Hammann, "*Wave function for smooth potential and mass step*", Phys. Rev., A59, 107, (1999).

[17] A. de Souza Dutra, C.A.S. Almeida, "*Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses*", Phys. Lett. A275, 25–30(2000).

[18] O. Mustafa, S. Habib Mazharimousavi, "*Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators*", Int. J. Theory. Phys. 46 ,1786-.1796 (2007).

[19] V. A. Smagley, M. Mojahedi, M. Osinski, "*Operator ordering of a positiondependent effective-mass Hamiltonian in lattice matched semiconductor superlattices and quantum wells*", Proc. SPIE vol. 4646, p. 258-270 (2002).

[20] T. Gora, F. Williams, "*Theory of Electronic States and Transport in Graded Mixed Semiconductors*", Phys. Rev. 177, 1179–1182 (1969).

[21] Qi-Gao Zhu and H. Kroemer, "*Interface connection rules for effective-mass wave functions at abrupt heterojunction between two different semi-conductors*", 85, Phys. Rev. B27, 3519-3527(1983).

[22] M. Chabab, A. El Batoul, H. Hassanabadi, M. Oulne, and S. Zare , "*Scattering states of Dirac particle equation with position dependent mass under the*

cusp potential", Eur. Phys. J. plus. 131 : 387 (2016).

[23] O. Panella, S. Biondini, A. Arda, "*New exact solution of the one dimensional Dirac Equation for the Woods-Saxon potential within the effective mass case*", J. Phys. A : Math. Theor. **43**, 325302(2010).

[24] P. Kennedy, J. Phys. "*The Woods-Saxon Potential in the Dirac Equation*", J. Phys. A35 : 689-698, (2002).

[25] L. Dekar, Chapitre III : *Fonctions de Bessel* du cours « *Fonctions Spéciales de la Physique* » L3 Physique Fondamentale 2020-2021, Faculté des Sciences, Université de Médéa.