



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Abdel Hamid Ibn Badis de Mostaganem  
Faculté des Sciences Exactes et l'Informatique

Domaine Sciences de la Matière

Département de Physique

**Projet de Fin d'Etudes**

**Pour l'obtention du Master en Physique**

Option : Modélisation et Caractérisation des Matériaux

Présenté

Par

**Douba Fatiha**

Sujet

**Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur  
le transport électronique dans un système ordonné à une dimension**

Soutenue le: 29 Mai 2016

Devant le jury composé de :

|                     |            |                          |           |
|---------------------|------------|--------------------------|-----------|
| Mr. Aibout Abdellah | Professeur | Université de Mostaganem | Président |
| Mr. Belhouari Aissa | M.C.A      | Université de Mostaganem | Examineur |
| Mr. Senouci Khaled  | Professeur | Université de Mostaganem | Encadreur |

Année universitaire : 2015-2016

## Introduction

Le début du XX<sup>ème</sup> siècle a vu naître de nouvelles disciplines en physique : la mécanique quantique et la dynamique non linéaire. La première a mis en évidence le double caractère onde-particule de la matière et la seconde le caractère non linéaire et souvent chaotique des systèmes dynamiques présents dans la nature.

La mécanique quantique est une mécanique des ondes, une des propriétés des ondes est leur capacité à interférer. Comme en optique ondulatoire, les effets d'interférence, par exemple la diffraction, sont visibles lorsque la longueur caractéristique du milieu interférentiel, par exemple la taille d'une fente, est comparable à la longueur d'onde considérée. La mécanique quantique traite donc des particules dont l'extension spatiale considérée sous la forme d'une onde d'amplitude de probabilité de présence appelée fonction d'onde est comparable à la longueur caractéristique du potentiel avec lequel elles interagissent.

Plusieurs résultats ont été obtenus pour les systèmes ordonnés utilisant différents modèles. Parmi les équations largement utilisées pour décrire la propagation de l'onde de la lumière et l'électron dans le cas actif et passif on cite les équations d'ondes indépendantes du temps de Schrödinger.

La propagation d'une onde électronique dans un système ordonné a fait l'objet de plusieurs travaux théorique. Ce travail a pour but de donner une description générale des propriétés de transport (transmission et réflexion en particulier) lors de la diffusion à une dimension d'une onde incidente par une région décrite en mécanique quantique, et d'initialiser l'étudiant aux différentes techniques de calcul du coefficient de transmission (avec la matrice de transfert).

Le premier chapitre est consacré à la présentation de théorème de Bloch et les principes de bases du transport en mécanique quantique. Les modèles choisis sont; le modèle standard de Kronig-Penney considérant une chaîne de potentiels atomiques périodiques sous forme soit de barrières rectangulaires soit de pic  $\delta$ , et le modèle de liaison fort, ainsi que la structure de bandes.

Dans le chapitre II, nous donnons le formalisme de la méthode de la matrice de transfert qui est la méthode la plus adaptée à notre étude.

Enfin, dans le chapitre III on s'est intéressé à l'effet des interactions non-linéaires sur la transmission. Ce travail s'achève par un résumé des principaux résultats obtenus avec les interprétations physiques associées.

## Table des matières

Introduction générale

### **CHAPITRE I : Propriétés de transport des systèmes ordonnés**

|     |   |   |
|-----|---|---|
| I.1 | Introduction .....  | 1 |
| I.2 | Théorème de Bloch.....                                      | 2 |
|     | I.2.a Conséquence de théorème de Bloch.....                 | 3 |
| I.3 | Modèles de Propagation d'une onde électronique.....         | 4 |
|     | I.3.a Modèle de Kronig-Penney.....                          | 4 |
|     | I.4.b Le modèle de liaisons fortes (The Tight-binding)..... | 7 |
|     | I.4.b.i Description du modèle .....                         | 8 |
| I.5 | Structure de bande.....                                     | 9 |
|     | I.5.a La théorie des liaisons fortes.....                   | 9 |
| I.6 | Le coefficient de transmission.....                         | 9 |

### **CHAPITRE II : Technique de la matrice de transfert**

|      |   |    |
|------|---|----|
| II.1 | Introduction .....  | 10 |
| II.2 | Une expérience de diffusion .....   | 11 |
| II.3 | Matrice de diffusion et matrice de transfert .....                            | 12 |
| II.4 | Transmission et la réflexion Amplitudes .....                                 | 13 |
| II.5 | Multiplication des matrices de transfert .....                                | 14 |
| II.6 | Potentiels rectangulaires .....   | 16 |
|      | II.6.a matrice de transfert .....   | 16 |
| II.7 | Transmission dans un système périodique $E > V_0$ .....                       | 18 |
|      | II.7.a Matrice de Transfert .....   | 19 |
|      | II.7.b Coefficient de transmission.....                                       | 20 |
| II.8 | Le modèle de Kronig-Penney dans la limite du potentiel de fonction delta..... | 20 |

**CHAPITRE III : Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension**

|       |   |    |
|-------|---|----|
| III.1 | Introduction .....  | 23 |
| III.2 | Formalisme .....  | 24 |
| III.3 | Résultats et discussion.....  | 25 |
| III.4 | L'effet de l'interaction non-linéaire sur le coefficient de transmission..... | 32 |
| III.5 | Résumé.....   | 34 |
|       | Conclusion.....   | 35 |

# Propriétés de transport des systèmes ordonnés

## I.1 Introduction :

Peu après la découverte de la mécanique quantique, les physiciens ont commencé à l'appliquer aux électrons dans les solides. Ils se sont intéressés en premier lieu aux cristaux comportant peu de défauts structuraux dans lesquels, les électrons sont soumis en première approximation à un potentiel ayant la même périodicité de translation que le cristal.

Grace au théorème de Bloch [1], les états électroniques sont classés selon une structure de bandes, ce qui a permis d'expliquer le caractère isolant ou métallique de nombreux cristaux en fonction de l'appartenance ou pas du niveau de Fermi à la bande interdite [2].

Dans ce chapitre on examinera le comportement des coefficients de transmission et de réflexion  $T$  et  $R$  en fonction de la largeur  $L$  du système dans le cas ordonné d'une structure à une barrière, double barrières, plusieurs barrières de potentiel ainsi que des potentiels en forme pics de delta. On utilisera pour cela l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans l'étude de la propagation de l'onde électronique. En plus on discutera les résultats trouvés pour la structure de bandes dans le cas d'une infinité de barrières et de puits de potentiel.

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

### I.2 Théorème de Bloch :

Les ondes de Bloch sont les fonctions d'ondes décrivant les états quantiques des électrons soumis à un potentiel périodique. C'est notamment le cas du cristal parfait infini. Les électrons sont soumis à un potentiel périodique ayant la symétrie de translation des atomes constituant le cristal.[3]

Considérons une particule de masse  $m$  dans un potentiel unidimensionnel, supposons que le potentiel  $V(x)$  soit périodique, avec une période  $a$  :[4]

$$V(x + a) = V(x) \quad (I. 1)$$

En termes plus formelles, on dit que le potentiel, et donc l'hamiltonien, sont invariants par translation de  $a$ . Quelles sont les conséquences de cette symétrie pour la fonction d'onde ?

Puisque l'hamiltonien ne change pas (est symétrique) par rapport à une translation de  $a$ , la densité de probabilité doit jouir de la même symétrie :

$$|\psi(x + a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (I. 2)$$

Cela implique que la fonction d'onde ne peut changer que par un facteur de phase. On écrira cette phase comme le produit du pas  $a$  et d'un paramètre arbitraire  $k$  :

$$\psi(x + a) = e^{ika} \psi(x) \quad (I. 3)$$

Observons que cette décomposition est ambiguë : Le paramètre  $k \stackrel{\text{def}}{=} k + \frac{2n\pi}{a} \quad n \in \mathbb{Z}$

Correspond à la même phase :

$$e^{ika} = e^{ik'a} \quad (I. 4)$$

L'ambiguïté de la décomposition disparaît si l'on limite les valeurs possibles de  $k$  à une seule période de la fonction  $e^{ika}$ , par exemple :  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

$$\text{Considérons maintenant la fonction } u_k(x) = e^{(-ikx)} \psi(x) \quad (I. 5)$$

est périodique :

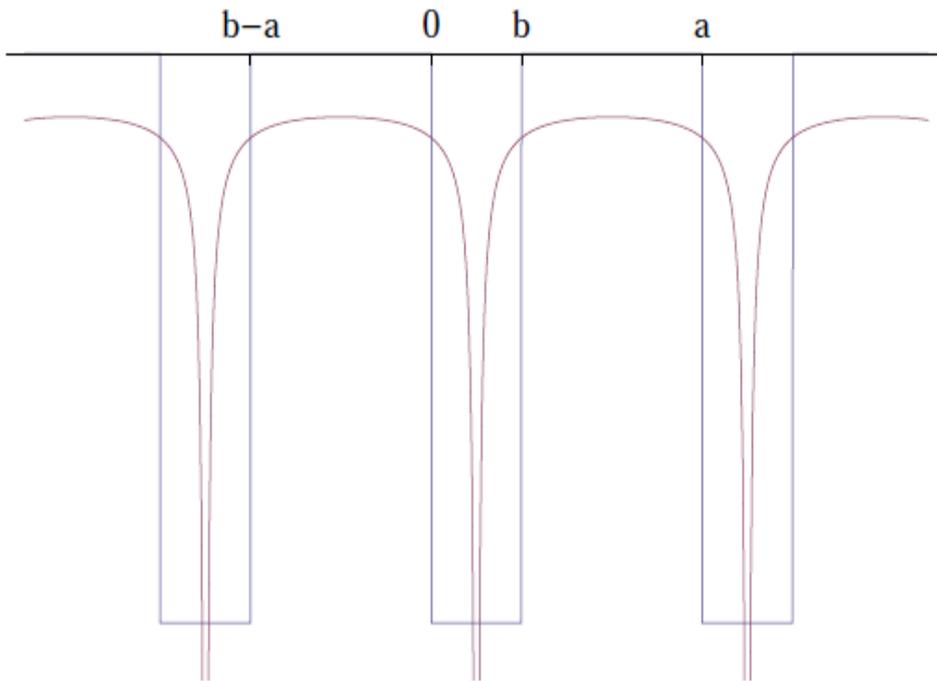
$$u_k(x + a) = e^{-ik(x+a)} \psi(x + a) \quad (I. 6)$$

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

$$u_k(x + a) = e^{-ik(x+a)} e^{ika} \psi(x) \quad (\text{I.7})$$

$$u_k(x + a) = e^{-ikx} \psi(x) \quad (\text{I.8})$$

$$u_k(x + a) = u_k(x) \quad (\text{I.9})$$



**Figure.I.1:** Le potentiel périodique ressenti par un électron dans un réseau unidimensionnel d'atome (ligne mauve) et la schématisation avec des puits de potentiel carrés (ligne bleue).

On a donc démontré le théorème de Bloch dans un potentiel unidimensionnel périodique, avec pas  $a$ , les fonctions d'onde propres sont de la forme :

$$\psi_k(x) = e^{-ikx} u_k(x) \quad (\text{I.10})$$

Avec  $u_k(x)$  périodique.

### I.2.a Conséquence du théorème de Bloch :

Le théorème de Bloch introduit un vecteur d'onde  $k$ . Il est nommé pseudo-moment de l'électron. Cette quantité remplace le moment  $p/\hbar$  de l'électron lorsqu'on passe du problème d'un électron se mouvant dans un milieu continu à celui d'un électron se mouvant dans un potentiel périodique. Ce pseudo-moment n'est pas proportionnel à  $p$ . [5]

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

En effet la dérivation  $\frac{\hbar}{i}\nabla$  introduit un terme supplémentaire  $e^{ikr}\frac{\hbar}{i}\nabla u_{k,n}(r)$ . Ainsi  $\psi_{k,n}$  n'est pas un état propre de l'opérateur quantité de mouvement. D'une façon plus générale, la non-conservation de la quantité de mouvement et le non pertinence de cette grandeur dans le cadre d'un potentiel périodique d'étendue spatiale infinie peut sembler surprenante [6].

### I.3 Modèles de Propagation d'une onde électronique

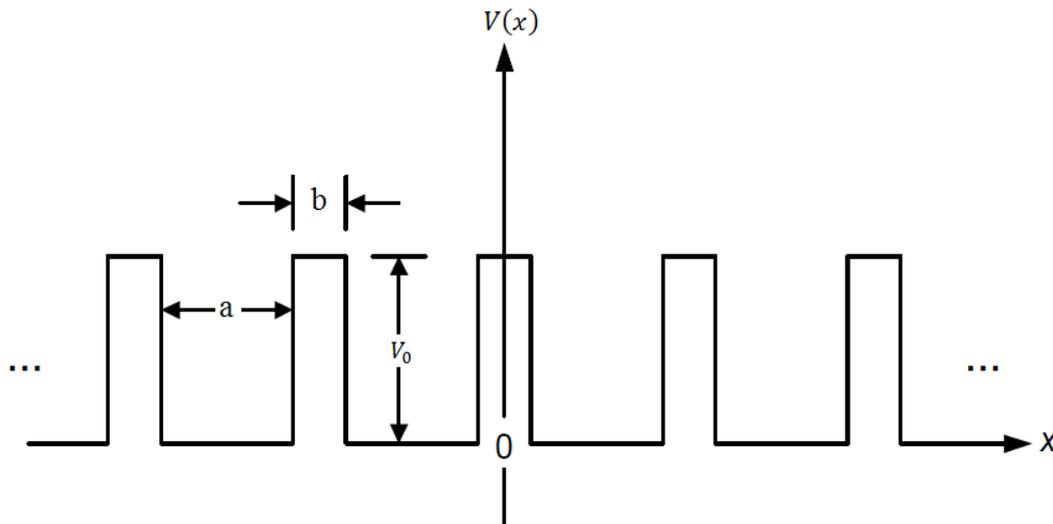
Pour étudier les propriétés de transport de système ordonné, on distingue deux modèles physique; le modèle de Kronig- Penney [7] et de Tight- Binding. [8]

#### I.3.a Modèle de Kronig-penney :

Le modèle Kronig - Penney représente le modèle le plus simple d'un système périodique. L'analyse des propriétés de transmission du modèle Kronig - Penney nous permet de comprendre les principales propriétés de transport électronique dans les solides. Les solides ont généralement une structure cristalline. Les ions sont agencés d'une manière qui présente une périodicité dans espace. Alors, quand une particule libre se propage dans un tel potentiel périodique, son mouvement sera touché par la périodicité spatiale.

Nous allons calculer le spectre d'énergie du modèle Kronig - Penney , qui se compose de bandes d'énergies autorisés, séparées par des espaces . La transmission est nulle dans les lacunes c'est à dire dans le gap. [9]

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés



**Figure I.2** : potentiel périodique de Kronig-Penney

L'équation de Schrödinger correspondant peut être lue :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \sum V\delta(x - x_n) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{I. 11})$$

Voici  $\psi(x)$  est la particule la fonction d'onde unique en  $x$ ,  $V$  l'intensité du potentielle et  $E$  l'énergie de la particule unique en unités de  $\frac{\hbar^2}{2m}$  avec  $m$  la masse électronique . Les deux extrémités du système sont supposées être connectées de façon ohmique à idéal des fils parfaits (où l'électron se déplace librement).

L'équation d'onde est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{I. 12})$$

Où  $V(x)$  Exprime l'énergie potentielle et  $E$  est une valeur propre de l'énergie. Dans l'intervalle  $0 < x < a$  , pour lequel  $V = 0$  ; la fonction propre est une combinaison linéaire, d'ondes planes qui se déplacent simultanément vers la droite et vers la gauche,

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{I. 13})$$

avec une énergie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{I. 14})$$

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

Dans l'intervalle  $-b < x < 0$ , correspondant à l'intérieur de la barrière, la solution aura la forme :

$$\psi(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad (\text{I. 15})$$

Avec

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{I. 16})$$

Nous recherchons la solution complète sous la forme d'une fonction du Bloch. La solution dans la région  $0 < x < a + b$  doit être reliée à la solution (15) de la région  $-b < x < 0$  d'après le théorème du Bloch :

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0)e^{ik(a+b)} \quad (\text{I. 17})$$

Qui permet de définir le vecteur d'onde servant à indexer les solutions.

Les coefficients  $A, B, C, D$  sont choisis de telle façon que  $\psi(x)$  et  $\frac{d\psi}{dx}$  soient continues aux points  $x = 0$  et  $x = a$ . Ce sont les conditions aux limites usuelles pour un problème de mécanique quantique avec un puits de potentiel carré. En  $x = 0$  :

$$A + B - C - D = 0 \quad (\text{I. 18})$$

$$ikA - ikB - QC + QD = 0 \quad (\text{I. 19})$$

En  $x = a$  et en utilisant l'équation (17) où  $\psi(a)$  et  $\psi(-b)$  exprimées du côté des barrières ne diffèrent que du facteur d'un facteur de phase  $e^{ik(a+b)}$ , on a :

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} - Ce^{ik(a+b)-Qb} - De^{ik(a+b)+Qb} = 0 \quad (\text{I. 20})$$

$$Aike^{ika} - Bike^{-ika} - CQe^{ik(a+b)-Qb} + DQe^{ik(a+b)+Qb} = 0 \quad (\text{I. 21})$$

Les quatre équations (20) à (21) ont une solution si et seulement si le déterminant des coefficients  $A, B, C, D$  est nul, c'est-à-dire si

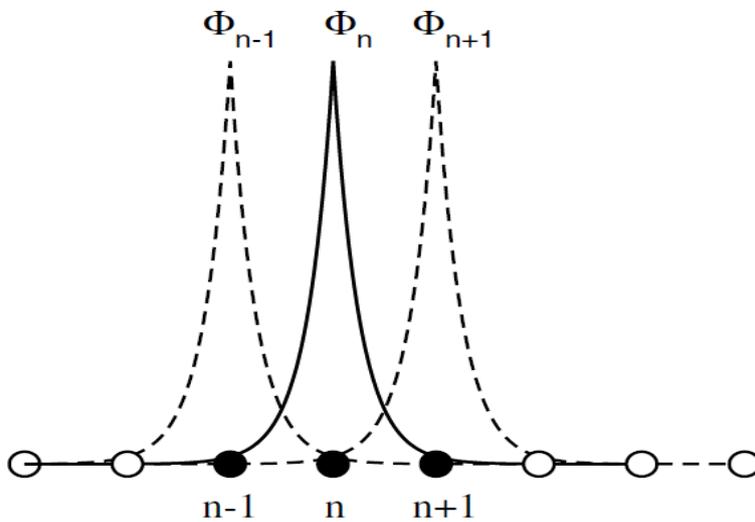
$$\left[ \frac{(Q^2 - k^2)}{2Qk} \right] \text{sh } Qb \sin ka + \text{ch } Qb \cos ka = \cos k(a + b) \quad (\text{I. 22})$$

### I.3.b Le Modèle de liaisons fortes ( Tight-binding ) :

En physique du solide, le modèle des liaisons fortes (ou modèle de TB) est une approche du calcul de structure de bande électronique en utilisant un ensemble approximatif de fonctions d'onde sur la base de la superposition des fonctions d'onde pour les isolés atomes situés sur

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

chaque site atomique. La méthode est étroitement liée à la méthode de LCAO utilisé en chimie [10]. Le modèle donne de bons résultats qualitatifs dans de nombreux cas et peut être combiné avec d'autres modèles qui donnent de meilleurs résultats lorsque le modèle de liaisons échoue. Bien que le modèle de liaison forte est un modèle à un électron, le modèle fournit également une base pour des calculs plus avancés comme le calcul des états de surface et de l'application à différents types de problème à plusieurs corps et des quasi particules calculs.[11]



**Figure I.3 :** Les fonctions d'onde atomiques de solide cristallin unidimensionnel. Les atomes sont placés dans des sites  $x_n$ , où  $n$  est un nombre entier.

Le modèle de liaison forte est généralement utilisé pour les calculs de structure de bande électronique et les lacunes de la bande dans le régime statique. Cependant, en combinaison avec d'autres méthodes telles que l'aléatoire approximation de phase modèle (APR).

### I.4.b.i. Description du modèle :

Le point de départ de base est l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un seul électron dans un réseau discret dimensions :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{I.23})$$

H est l'hamiltonien des liaisons fortes.

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés

$$H = \sum_n V_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq m} t_{n,m} |n\rangle\langle m| \quad (\text{I. 24})$$

Où  $V_n$  est l'énergie potentielle d'une particule quantique occupant le site  $n$  avec la coordonnée  $x_n$ , et  $|n\rangle$  représentent l'orbitale atomique, appelé également la fonction Wannier.

Nous avons supposé que l'orbitale atomique  $|n\rangle$  centré autour du site  $n$  chevauchements faiblement avec les orbitales atomiques aux autres sites du réseau. Le saut de (chevauchement) élément de la matrice entre les atomes au niveau du site  $n$  et  $m$  est désigné par  $t_{n,m}$ .

Dans ce modèle, l'analyse se limite à une interaction du plus proche voisin, c'est-à-dire  $t_{n,m} = 0$

Lorsque  $|n - m| \neq 1$ . L'équation (24) simplifie la forme bien connue [12]

$$H = \sum_n V_n |n\rangle\langle n| + t_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + t_{n,n-1} |n\rangle\langle n-1| \quad (\text{I. 25})$$

Depuis, les orbitales  $\{|n\rangle\}$  constitue une base orthonormée de l'espace de Hilbert du système, les états propres peuvent être écrites comme:

$$|\psi\rangle = \sum_n u_n |n\rangle \quad (\text{I. 26})$$

En multipliant l'équation de Schrödinger (23) avec  $\langle n|$ , l'équation de Schrödinger est ensuite traduite en une équation discrète pour les coefficients  $u_n$  [13].

$$Eu_n = V_n u_n + t_{n,n+1} u_{n+1} + t_{n,n-1} u_{n-1} \quad (\text{I. 27})$$

Dans un réseau périodique, quand  $x_n = na$ , l'énergie potentielle  $V_n$  et les intégrales de recouvrement (énergie de saut)  $t_{n,m}$  dans tous les sites sont identiques.

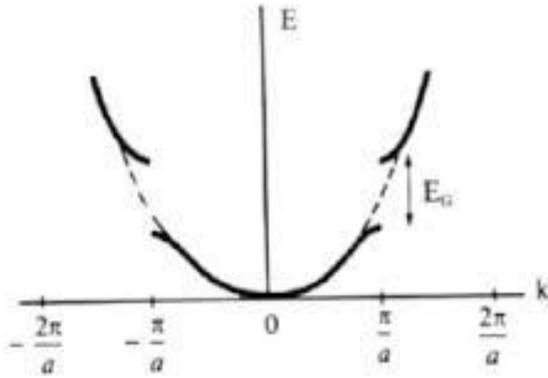
### I.5 Structure de bande :

La théorie des bandes est un modèle quantique en physique des solides qui détermine les énergies possibles des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique. Il est issu de la théorie des orbitales moléculaires.

Dans un solide, les niveaux d'énergie permis sont confinés dans une bande dont la largeur, de l'ordre de l'électron-volt, dépend du cristal et du recouvrement des orbitales atomiques.

Les solides ont une structure de bandes; on distingue les bandes d'énergie permises, et les bandes d'énergie interdites voir la figure 4.[14]

## Propriétés de transport des systèmes ordonnés



**Figure I.4 :** La structure de bande au première zone de Brillouin

### I.5.a La théorie des liaisons fortes :

Dans le cadre de la théorie des liaisons fortes, on tente d'obtenir les propriétés du solide à partir des orbitales atomiques. On part des états électroniques des atomes séparés et on considère la manière dont ils sont modifiés par le voisinage des autres atomes. Les effets à prendre en compte sont notamment l'élargissement des bandes (un état a une énergie discrète dans la limite atomique, mais occupe une bande d'énergie dans le solide) et l'hybridation entre les bandes d'énergies proches.

### I.6 Coefficient de transmission :

Le coefficient de transmission est le paramètre le plus utilisé dans l'étude des propriétés de transport électronique dans les super-réseaux [15] et le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés. Cette quantité physique est définie comme la probabilité de transfert de l'onde électronique à l'autre extrémité du système. à 1D le coefficient de transmission se comporte comme suit :(pour un système désordonné à une dimension)

$$T \propto e^{-2\gamma L}$$

Où  $\gamma$  et  $L$  étant l'exposant de Lyapunov et la longueur du système respectivement. Dans le cas des états localisés, l'électron se trouve confiné dans une région limitée du système, par conséquent, le coefficient de transmission décroît rapidement.

# Technique de la matrice de transfert

## II.1 Introduction :

Dans ce chapitre nous introduisons une méthode mathématique pour l'analyse plusieurs problèmes de propagation des ondes dans les systèmes unidimensionnels [16]. La méthode utilise la matrice du transfert et est facilement connu comme la méthode de la matrice de transfert. [7, 8]

L'avantage de cette théorie est qu'elle n'a pas besoin des fonctions mathématiques spéciales, [17] en plus, cette méthode nous permet d'introduire une méthode numérique simple basée sur des relations récursive pour un potentiel général. Par l'intermédiaire du formalisme de la matrice de transfert, les amplitudes de transmission et de réflexion peuvent être facilement définis et évalués. [18]

# Technique de la matrice de transfert

## II.2 Une expérience de diffusion :

Peut-être le problème le plus simple de la mécanique quantique est la propagation à une dimension d'un électron en présence d'un potentiel localisé. Le mouvement d'une particule quantique de masse  $m$ , en présence d'un potentiel  $V(x)$  dans une dimension est régie par l'équation de Schrödinger. [19]

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

Ici,  $\psi(x)$  est la fonction d'onde et  $E$  l'énergie de l'électron (en unit é de Rydberg).

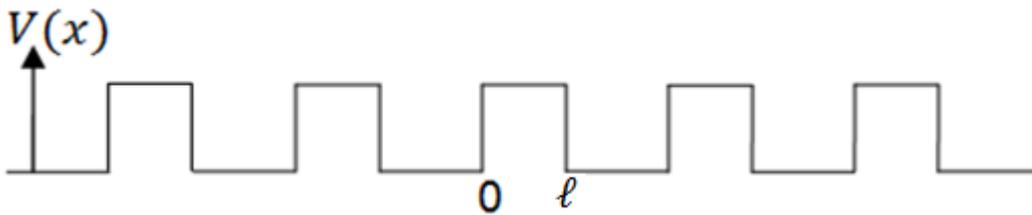


Figure II.1 : potentiel périodique de Kronig-Penney

Pour plus de simplicité, nous supposons que le potentiel  $v(x)$  est non nul seulement à l'intérieur d'une région finie Figure II.1,

$$V(x) = \begin{cases} V(x), & 0 \leq x \leq \ell \\ 0, & x < 0 \text{ et } x \geq \ell \end{cases} \quad (\text{II. 2})$$

Un électron se rapproche de l'échantillon représenté par le potentiel  $v(x)$  des moyens de diffusion de l'électron qui est soit réfléchi ou transmis à travers l'échantillon. Nous pouvons mesurer les amplitudes de transmission et de réflexion,  $t$  et  $r$ , respectivement, nous pouvons extraire des informations sur les propriétés physiques de l'échantillon. [20]

Nous supposons que l'équation de Schrödinger en dehors de la région de potentiel est connue et que la fonction d'onde peut être écrite comme une superposition d'ondes planes:

$$\psi_L(x) = \psi_L^+(x) + \psi_L^-(x) \quad x < 0 \quad (\text{II. 3})$$

$$\psi_R(x) = \psi_R^+(x) + \psi_R^-(x) \quad x > \ell \quad (\text{II. 4})$$

## Technique de la matrice de transfert

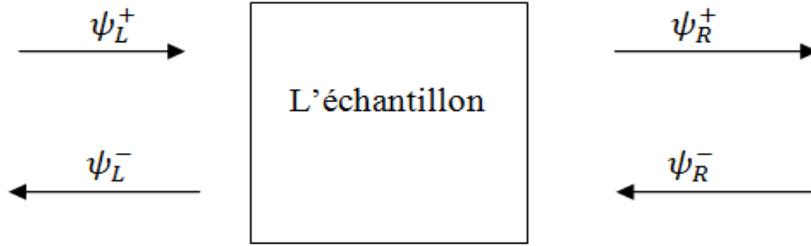


Figure II.2. Expérience typique de diffusion.

Les composantes de la fonction d'onde peuvent être exprimées comme :

$$\begin{aligned} \psi_L^+(x) &= A_1 e^{+ikx} , & \psi_L^-(x) &= B_1 e^{-ikx} \\ \psi_R^+(x) &= A_2 e^{+ikx} , & \psi_R^-(x) &= B_2 e^{-ikx} \end{aligned} \quad (\text{II. 5})$$

Ici,  $k$  est le vecteur d'onde liée à l'énergie.

### II.3 Matrice de diffusion et matrice de transfert :

La solution générale de  $\psi(x)$  de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad (\text{II. 6})$$

Doit être une fonction continue de la position  $x$ . La même chose doit être vraie pour la première dérivée  $\frac{d\psi(x)}{dx}$ , est exprimée ici en unités de  $\frac{2m}{\hbar^2}$

En particulier, l'exigence de la continuité de la fonction d'onde et sa dérivé aux bornes de potentiel  $V(x)$  donne :

$$\psi_L(x = 0^-) = \psi(x = 0^+), \quad \frac{\partial \psi_L(x)}{\partial x} = \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \quad (\text{II. 7})$$

Sur la limite gauche de l'échantillon,

$$\psi(x = \ell^-) = \psi_R(x = \ell^+), \quad \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_R(x)}{\partial x} \quad (\text{II. 8})$$

Et sur la limite droite. Ici,  $\Phi(x)$  est la solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la région de potentiel  $0 \leq x \leq \ell$ . Généralement,  $\Phi(x)$  ne peut pas être exprimée comme une superposition simple, de propagation d'ondes. Les relations linéaires en générale entre les ondes entrantes et sortantes peuvent être écrites comme :

## Technique de la matrice de transfert

$$\begin{pmatrix} \psi_L^-(0) \\ \psi_R^+(\ell) \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \psi_L^+(0) \\ \psi_R^-(\ell) \end{pmatrix} \quad (\text{II. 9})$$

Lorsque la matrice S,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 10})$$

Par définition, la matrice S concerne les ondes sortantes aux ondes entrantes comme le montre la figure II.2. Ses éléments caractérisent complètement les propriétés de diffusion et de transmission du potentiel V(x) à une dimension.

On peut aussi définir la matrice de transfert M par la relation :

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(\ell) \\ \psi_R^-(\ell) \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \psi_L^+(0) \\ \psi_L^-(0) \end{pmatrix} \quad (\text{II. 11})$$

La matrice M exprime les coefficients de la fonction d'onde sur le côté droit de l'échantillon en fonction des coefficients de la fonction d'onde sur le côté gauche.

En comparant les équations linéaires (9) et (11), il est facile d'exprimer les éléments de la matrice de transfert M en ce qui concerne les éléments de la matrice de diffusion S [21] :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}} & \frac{S_{22}}{S_{12}} \\ -\frac{S_{11}}{S_{22}} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 12})$$

De façon équivalente, on peut exprimer les éléments de la matrice de diffusion S en ce qui concerne les éléments de la matrice de transfert:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{M_{21}}{M_{22}} & \frac{1}{M_{22}} \\ M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} & \frac{M_{12}}{M_{22}} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 13})$$

### II.4 Transmission et la réflexion Amplitudes :

Pour trouver la signification physique des éléments de la matrice de diffusion S, nous revenons à l'expérience de diffusion précédente. Considérons une particule qui approche l'échantillon de la droite. Comme aucune particule ne vient de la gauche, nous avons

$$\psi_L^+ = 0 \quad (\text{II. 14})$$

On normalise également l'onde incidente à l'unité,

## Technique de la matrice de transfert

$$|\psi_R^-|^2 = 1 \quad (\text{II. 15})$$

De l'équation (10), on obtient que l'onde émise  $\psi_R^-$  est donnée par :

$$\psi_L^-(x = 0) = S_{12}\psi_R^-(x = \ell) \quad (\text{II. 16})$$

Et l'onde réfléchie

$$\psi_L^+(x = 0) = S_{22}\psi_R^-(x = \ell) \quad (\text{II. 17})$$

Nous appelons  $S_{12}$  l'amplitude de transmission  $t$  et  $S_{22}$  la réflexion en amplitude  $r$ :

$$t = S_{12}, r = S_{22} \quad (\text{II. 18})$$

De la même manière, nous ne considérons que la diffusion de la particule provenant de la partie gauche du potentiel. Nous obtenons  $r' = S_{11}$  l'amplitude de la réflexion, et  $t' = S_{21}$  l'amplitude de la transmission.

Nous pouvons écrire la matrice de diffusion  $S$  sous la forme :

$$S = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix} \quad (\text{II. 19})$$

En utilisant la relation entre la matrice de diffusion et des matrices de transfert, l'équation (13), nous pouvons exprimer la matrice de transfert sous la forme :

$$M = \begin{pmatrix} t' - rt^{-1}r' & rt^{-1} \\ -t^{-1}r' & t^{-1} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 20})$$

### II.5 Multiplication des matrices de transfert :

Considérons une expérience plus complexe dans lequel la particule est diffusée par deux échantillons individuels. Le premier échantillon est donnée par le potentiel  $V_1(x)$ , situé à  $(a < x \leq b)$ , et le second échantillon est déterminé par le potentiel  $V_2(x)$ , Situé à  $(b \leq x < c)$ . Le problème de la transmission et de la réflexion à travers un tel système peut être traité de deux façons: soit nous pouvons utiliser les matrices de transfert  $M_1$  et  $M_2$ , qui déterminent les propriétés de diffusion de potentiels individuels  $V_1$  et  $V_2$ , ou nous pouvons considérer le potentiel  $V_{12}(x)$  définie sur l'intervalle  $a \leq x \leq c$  et utiliser la matrice de transfert correspondant  $M_{12}$ .

## Technique de la matrice de transfert

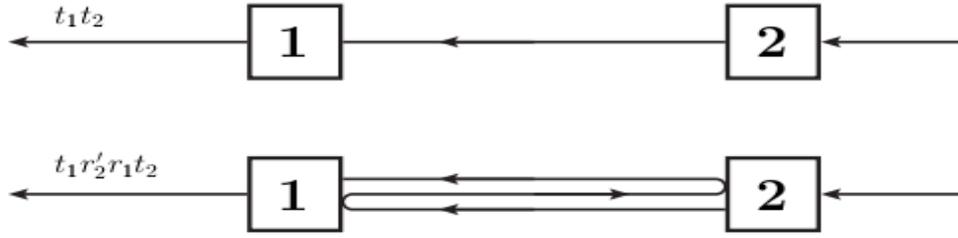


Figure.II.3 : Schéma expliquant de calcul de la transmission par l'intermédiaire de deux barrières

Deux échantillons sont représentés schématiquement à la figure II.2 Puis, à partir de la définition de la matrice de transfert  $M$ , l'équation (12), nous avons :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 21})$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 22})$$

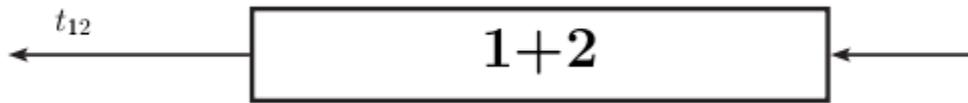


Figure.II.4: Transmission des électrons à travers l'ensemble du système consistant en deux échantillons 1-2

En combinant les équations (21) et (22), nous obtenons

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_2 M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 23})$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_{12} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 24})$$

A partir de la formule cette forme (23) et (24) la loi de composition est donnée par :

$$M_{12} = M_2 M_1 \quad (\text{II. 25})$$

La relation de composition (25) peut être facilement généralisée pour le cas de  $N$  obstacles, conduisant à la matrice de transfert  $M$  donnée par :

$$M = M_N M_{N-1} \dots M_2 M_1 = \prod_i^N M_i \quad (\text{II. 26})$$

# Technique de la matrice de transfert

## II.6 Potentiels rectangulaires

La barrière de potentiel rectangulaire, comme le montre la figure II.4, représente l'un des plus simples problèmes de mécanique quantique. Nous allons utiliser notre formalisme de la matrice de transfert, afin de déterminer les coefficients de transmission et de réflexion. [22]

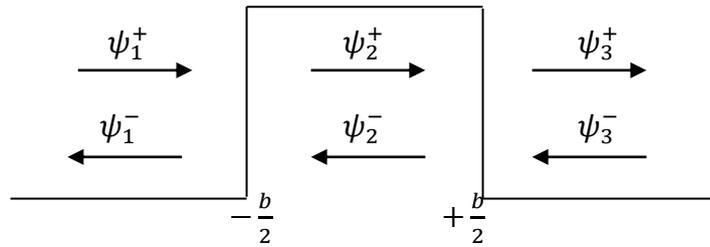


Figure II.5 : Barrière de potentiel rectangulaire de largeur  $b$  et la hauteur  $V_0$  [20] ◀

### II.6.a matrice de transfert :

La solution de l'équation de Schrödinger (II.6) dans trois régions différentes représentées dans la figure II.5 peut être exprimée comme une superposition d'ondes planes

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{+ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} , & x \leq -\frac{b}{2} \\ \psi_2(x) = A_2 e^{+ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} , & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ \psi_3(x) = A_3 e^{+ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} , & x > +\frac{b}{2} \end{cases} \quad (\text{II. 27})$$

Ici,  $k$  est donnée par :

$$k_1 = k_3 = \sqrt{E} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{E - V_0} \quad (\text{II. 28})$$

On prend  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$ .

Selon notre définition de la matrice de transfert, [23] et les conditions de continuité des fonctions d'onde et ces dérivées à  $x = -b/2$ . Les amplitudes des fonctions d'onde  $\psi_1(x)$

et  $\psi_2(x)$  sont reliés par:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1+k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2-k_1)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_2-k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1+k_2)\frac{b}{2}} \\ \left(\frac{k_2-k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1+k_2)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_1+k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1-k_2)\frac{b}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 29})$$

## Technique de la matrice de transfert

Les conditions de continuité à pour  $x = +b/2$  sont similaires [24]. Ils donnent :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2+k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2-k_3)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_3-k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2+k_3)\frac{b}{2}} \\ \left(\frac{k_3-k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2+k_3)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_2+k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3-k_2)\frac{b}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 30})$$

En recombinaut les équations (29) et (30), nous obtenons

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 31})$$

Tel que les éléments de la matrice  $M$  sont définies

par :

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2+k_3)(k_1+k_2)e^{ik_2b} + (k_3-k_2)(k_2-k_1)e^{-ik_2b}] e^{-i(k_1+k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2+k_3)(k_2-k_1)e^{ik_2b} + (k_3-k_2)(k_2+k_1)e^{-ik_2b}] e^{i(k_1-k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{21} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3-k_2)(k_2+k_1)e^{ik_2b} + (k_2+k_3)(k_2-k_1)e^{-ik_2b}] e^{i(k_3-k_1)\frac{b}{2}} \\ M_{22} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3-k_2)(k_2-k_1)e^{ik_2b} + (k_2+k_3)(k_1+k_2)e^{-ik_2b}] e^{i(k_1+k_3)\frac{b}{2}} \end{cases} \quad (\text{II. 32})$$

Si  $k_1 = k_3$  la matrice de transfert  $M$  se réduit à : [20,21]

$$M = \begin{pmatrix} \left[ \cos k_2b + \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{-ik_1b} & \frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b \\ -\frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b & \left[ \cos k_2b - \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{+ik_1b} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 33})$$

On peut facilement vérifier que  $M$  satisfait à l'exigence de la conservation du courant. En outre, nous constatons que

$$M_{22} = M_{11}^* \quad , \quad M_{21} = M_{12}^* \quad (\text{II. 34})$$

De sorte que la matrice de transfert est de la forme donnée par l'équation :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \quad (\text{II. 35})$$

## Technique de la matrice de transfert

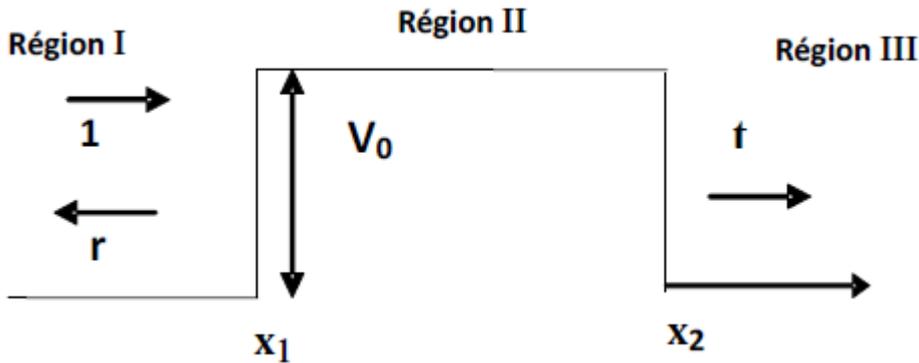
$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}]e^{-ik_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}]e^{ik_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{21} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}]e^{ik'_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{22} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}]e^{-ik'_{13}\frac{b}{2}} \end{cases} \quad (\text{II. 36})$$

Ici, nous avons défini:

$$\alpha_{21} = 1 + \frac{k_2}{k_1}, \alpha'_{21} = 1 - \frac{k_2}{k_1}, \alpha_{32} = 1 + \frac{k_3}{k_2}, \alpha'_{32} = 1 - \frac{k_3}{k_2}, k'_{13} = (k_1 - k_3)$$

Et  $k_{13} = (k_1 + k_3)$ . [25]

### II.7 Transmission dans un système périodique $E > V_0$ :



**Figure II.6:** Représentation du processus de diffusion à travers une barrière de potentiel rectangulaire.

Le modèle considéré ici est constitué d'un seul électron d'énergie  $E$  se déplaçant le long d'un réseau périodique unidimensionnel de  $N$  potentiels de barrières rectangulaires équidistants avec un paramètre de maille  $a$  [26]. L'équation de Schrödinger correspondant est

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II. 37})$$

Ici,  $E$  est l'énergie de l'électron est mesurée en unités atomiques, et  $\psi$  est la fonction d'onde.

La forme générale de potentiel  $V(x)$  est : [27]

## Technique de la matrice de transfert

$$V(x) = \begin{cases} V_n, & na - \frac{b}{2} \leq x \leq na + \frac{b}{2} \\ 0, & x < na - \frac{b}{2} \text{ et } x > na + \frac{b}{2} \end{cases} \quad (\text{II. 38})$$

### II.7.a Matrice de Transfert :

Concernant l'équation indépendante du temps, elle fournit le résultat général pour la fonction d'onde dans les trois régions comme suite:

$$\psi_j(x) = A_j e^{+ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} \quad (\text{II. 39})$$

$A_j$  et  $B_j$  sont les amplitudes des fonctions d'onde et  $k_j$  sont les vecteurs d'onde dans trois régions différentes [28]. La construction de la matrice de transfert  $M_n$  dans la nième cellule est faite en imposant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points de discontinuité du potentiel. Explicitement, par une barrière de potentiel donnée, comme illustré sur la figure. II.5, on obtient:

Pour  $x = na - \frac{b}{2}$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1+k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1-k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2-k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1+k_2)(na - \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_2-k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1+k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_1+k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2-k_1)(na - \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 40})$$

et pour  $x = na + \frac{b}{2}$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2+k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2-k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_3-k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2+k_3)(na + \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_3-k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2+k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2+k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3-k_2)(na + \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 41})$$

Selon notre définition de la matrice de transfert, l'équation (6), et les deux dernières équations (40) et (41), nous pouvons écrire la matrice des éléments de transfert  $M_n$  de la cellule unique comme:

$$\begin{cases} M_{n11} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2+k_3)(k_1+k_2)e^{ik_2b} + (k_3-k_2)(k_2-k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1-k_3)na - (k_1+k_3)\frac{b}{2}]} \\ M_{n12} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2+k_3)(k_2-k_1)e^{ik_2b} + (k_3-k_2)(k_2+k_1)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1+k_3)na + (k_3-k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n21} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3-k_2)(k_2+k_1)e^{ik_2b} + (k_2+k_3)(k_2-k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1+k_3)na + (k_3-k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n22} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3-k_2)(k_2-k_1)e^{ik_2b} + (k_2+k_3)(k_1+k_2)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1-k_3)na - (k_1+k_3)\frac{b}{2}]} \end{cases} \quad (\text{II. 42})$$

Avec :

$$k_2 = \sqrt{E - V_0} \quad (\text{II. 43})$$

Si on prendre

$$k_1 = k_3 = \sqrt{E} \quad (\text{II. 44})$$

## Technique de la matrice de transfert

On trouve la matrice

$$\mathbf{M}_n = \begin{pmatrix} \left[ \cos k_2 b + \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{-ik_1 b} & \left[ \frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b \right] e^{-2ik_1 n a} \\ \left[ -\frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b \right] e^{2ik_1 n a} & \left[ \cos k_2 b - \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{+ik_1 b} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 45})$$

### II.7.b Coefficient de transmission :

Le coefficient de transmission peut être obtenu soit à partir de la matrice de diffusion S, l'équation (II.19), ou à partir de la matrice de transfert M, l'équation (II.20), avec

$$T = |t|^2 = |S_{12}|^2 = \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (\text{II. 46})$$

On peut aussi calculer le coefficient de transmission T en utilisant l'expression suivante :

$$T = |t|^2 = \frac{|t|^2}{|t|^2 + |r|^2} = \frac{1}{1 + \left| \frac{r}{t} \right|^2} = \frac{1}{1 + |M_{12}|^2} \quad (\text{II. 47})$$

Donc le coefficient de transmission T :

$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2(k_2 b)} \quad (\text{II. 48})$$

### II.8. Le modèle de Kronig-Penney dans la limite du potentiel de fonction delta :

Dans ce modèle, le potentiel V (x) comprenant N potentiels de pic  $\delta$  équidistants avec un paramètre de maille a a la forme générale : [29]

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V_0 \delta(x - x_n) \quad (\text{II. 49})$$

Nous considérons d'abord l'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension:

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=1}^N V_0 \delta(x - x_n) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II. 50})$$

Ici  $\psi(x)$  est la fonction d'onde de particule en x,  $V_0$  est le potentiel et E l'énergie de la particule en unités de  $\hbar^2/2m$

## Technique de la matrice de transfert

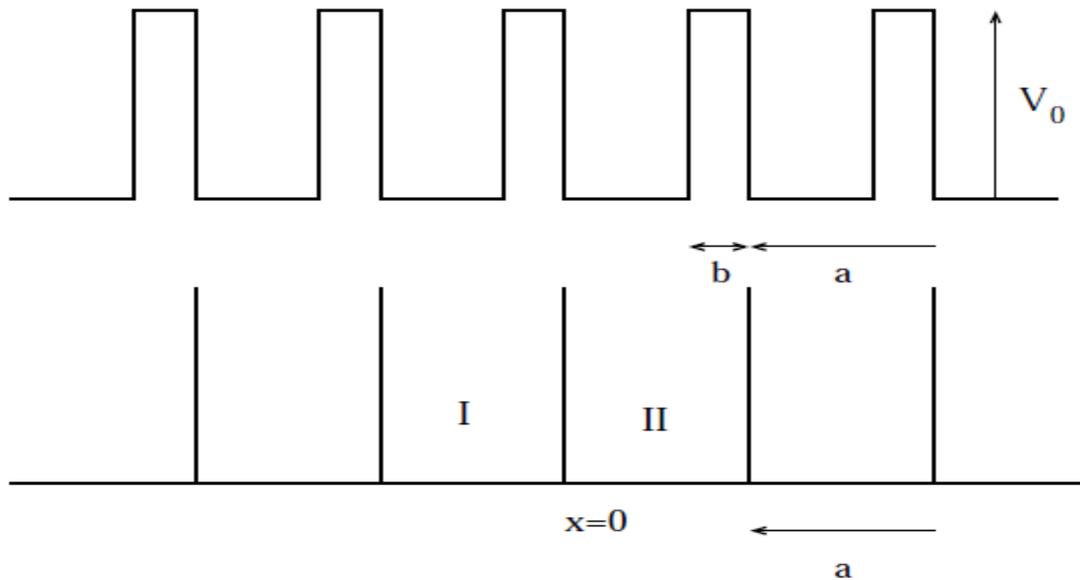


Figure II.6 : modèle de Kronig-Penney; potentiel rectangulaire (en haut) modèle de Kronig-Penney; potentiel delta (en bas).

Pour évaluer les propriétés de transmission, il est commode d'utiliser la technique de la matrice de transfert. L'amplitude relative des fonctions d'onde des cellules voisines est obtenue pour un système de  $N$  sites par le produit des matrices de transfert pour chaque cellule individuelle.

Comme il n'y a pas de potentiel dans la région entre deux barrières voisines,  $x_n < x < x_{n+1}$ , la fonction d'onde d'un électron dans cette région peut être écrite comme une superposition d'ondes planes d'une particule libre:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \quad (\text{II. 51})$$

Où  $\psi_n(x)$  sont les fonctions d'onde dans un ensemble discret de points spatiaux  $x_n = na$  [1], et  $k_1 = \sqrt{E}$  représente le vecteur d'onde de la particule libre.

En utilisant les formules (II.21) pour la matrice de transfert de modèle de Kronig-penny avec potentiels rectangulaires et effectuer la procédure limite donnée à la section précédente [1]. Nous pouvons immédiatement écrire la matrice de transfert,  $\mathbf{M}_n$  concernant les amplitudes  $(A_n, B_n)$  et  $(A_{n+1}, B_{n+1})$  pour le transfert d'un électron d'une cellule à l'autre :

$$\mathbf{M}_n = \begin{pmatrix} 1 + \frac{V_0}{2ik_1} & \frac{V_0}{2ik_1} \\ -\frac{V_0}{2ik_1} & 1 - \frac{V_0}{2ik_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 52})$$

## Technique de la matrice de transfert

La matrice de transfert totale  $M$  pour un réseau avec  $N$  cellules est obtenue à partir de:

$$M = \prod_n M_n \quad (\text{II.53})$$

# Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

## III.1 Introduction :

La propagation d'onde dans un milieu non linéaire est un sujet de recherche qui a été récemment intensivement étudié [29]. L'étude de ce phénomène est d'une grande importance pratique dans la compréhension des propriétés de transport des super-réseaux [30], le comportement électronique dans les composants mésoscopiques et les phénomènes optiques en général.

Le but de ce chapitre est d'étudier comment la décroissance de la transmission est affectée par les interactions non linéaires (électron-électron et électron-phonon) en général pour les systèmes ordonnés.

Nous utilisons un modèle simple de Kronig-Penney avec des potentiels en pic  $\delta$  qui simule les interactions à courte distance. Nous nous limitons uniquement à la situation où le "output" est fixé et nous nous intéressons à trouver le "input" nécessaire. Nous voulons étudier l'effet des interactions non-linéaires sur la transmission d'un modèle de Kronig-Penney de réseau ordonné.

# Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

## III.2 Formalisme :

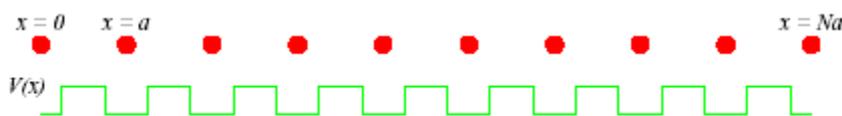
On considère un électron se propageant dans une chaîne ordonné en présence des interactions non-linéaires.

L'équation de Schrödinger non-linéaire est donnée par :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_n (V_0 + \alpha |\psi(x)|^2) \delta(x - na) \right\} \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{III. 1})$$

Ici  $\psi(x)$  est la fonction d'onde de la particule à  $x$ ,  $V_0$  l'intensité du potentiel,  $\alpha$  l'intensité de l'interaction non-linéaire et  $E$  l'énergie de la particule en unité de  $\frac{\hbar^2}{2m}$  avec  $m$  la masse effective électronique. Pour la simplicité la charge électronique  $e$  et le paramètre du réseau  $a$  sont pris comme unité.

La nature locale de l'interaction non linéaire dans l'équation (III.1) provient, non seulement de sa simplicité pour les calculs numériques, mais aussi du point de vue physique que plusieurs interactions menant au non linéarité sont de nature locale telle que les interactions coulombiennes.



**Figure III.1:** modèle de Kronig-Penney pour une chaîne ordonnée.

Du point de vue des calculs, il est plus utile de considérer la version discrète de cette équation appelée la représentation de Poincaré et peut être dérivée sans aucune approximation à partir de l'équation (III.1). Elle s'écrit [31] :

$$\psi_{n+1} = \left[ 2 \cos k + \frac{\sin k}{k} (V_n + \alpha |\psi_n|^2) \right] \psi_n - \psi_{n-1} \quad (\text{III. 2})$$

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

Où  $\psi_n$  est la valeur de la fonction d'onde au site  $n$  et  $k = \sqrt{E}$  est le nombre d'onde de l'électron au site  $n$ . Cette représentation relie les valeurs de la fonction d'onde à trois positions successives discrètes le long de l'axe  $x$  sans limitation sur la forme du potentiel à ses points et elle convient beaucoup pour les calculs numériques. La solution de l'équation (III.2) est réalisée itérativement en prenant pour nos conditions les valeurs suivantes aux sites

1 et 2 :

$$\psi_1 = e^{(-ik)} \quad \text{et} \quad \psi_2 = e^{(-2ik)}$$

### III.3 Résultats et discussion :

Pour voir l'effet des interactions non linéaires sur les propriétés de transport, nous commençons par l'étude de ses effets sur une structure à double barrières et double puits.

Une augmentation de la largeur de la bande interdite indique un phénomène de localisation alors que la décroissance de cette bande indique une délocalisation des états électroniques.

Sur la figure III nous avons tracé la transmission  $\text{Ln}(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour différentes valeurs de l'interaction non-linéaires  $\alpha$ .

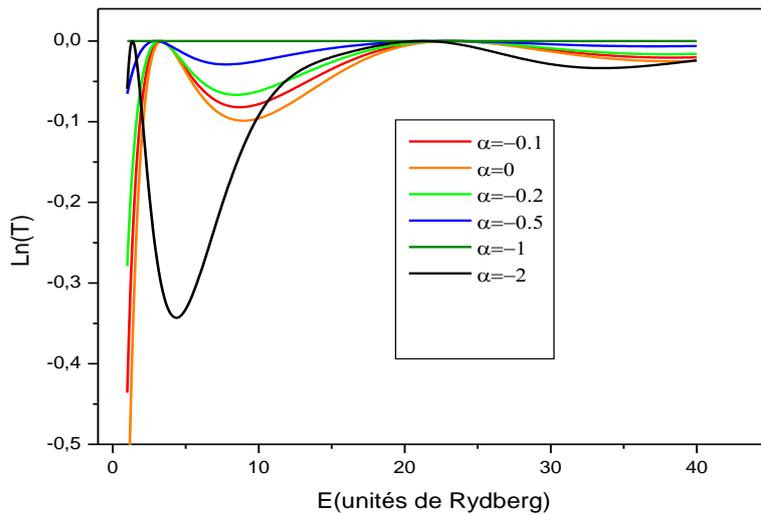
On commence par étudier l'effet de l'interaction électron-phonon ( $\alpha < 0$ ) sur un système de potentiels en barrières.

Le résultat est montré sur la figure III.1. Cette figure montre qu'en augmentant  $\alpha$  en valeur absolue, on remarque que la profondeur des vallées (correspondant au gap) diminue et la largeur des bandes permises augmente à condition que  $|\alpha| < V_0$ . Donc pour les potentiels en barrières, l'interaction électron-phonon délocalisent les états électroniques à condition que  $|\alpha| < V_0$ .

Pour des valeurs  $|\alpha| > V_0$  ; le comportement est inversé : la profondeur des vallées augmente et la largeur des bandes permises diminue, indiquant une localisation des états électroniques.

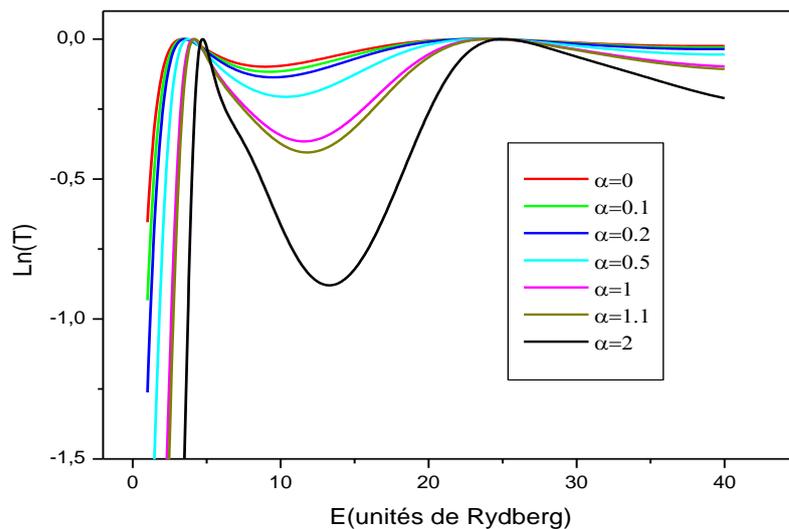
Donc, il existe une intensité d'interaction critique  $|\alpha_c| = V_0$  au-delà du quelle le comportement est inversé.

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension



**Figure III.1 :** le coefficient de transmission  $\ln(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les potentiels en barrières,  $\alpha < 0$ .

Dans le cas  $\alpha > 0$  (interaction électron-électron), on remarque (figure III.2) qu'en augmentant l'intensité de l'interaction  $\alpha$ , la profondeur des vallées (correspondant au gap) augmente et la largeur des bandes permises diminue. Donc pour les potentiels en barrières, l'interaction électron-électron localise les états électroniques. Ceci est valable quel que soit  $\alpha > 0$ .

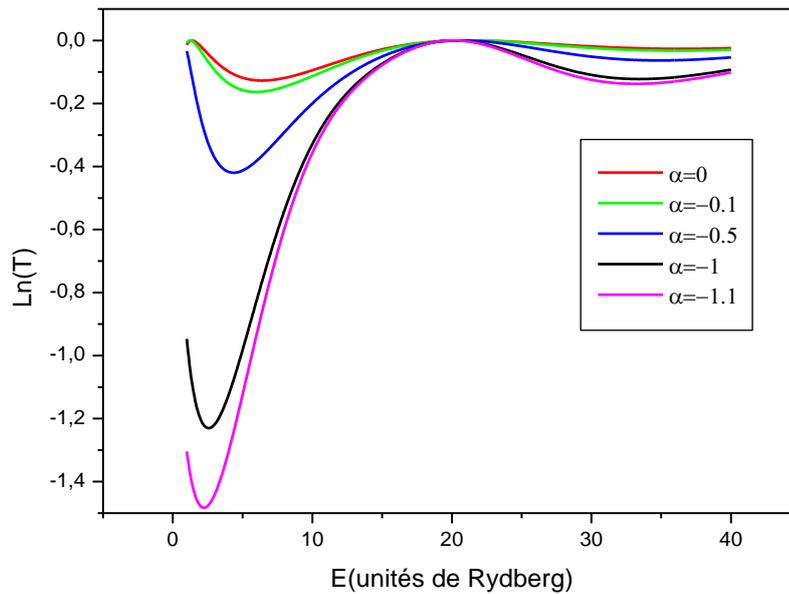


**Figure III.2 :** le coefficient de transmission  $\ln(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les potentiels en barrières,  $\alpha > 0$ .

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

La même étude est faite pour le cas de potentiels en puits ( $V_0 < 0$ )

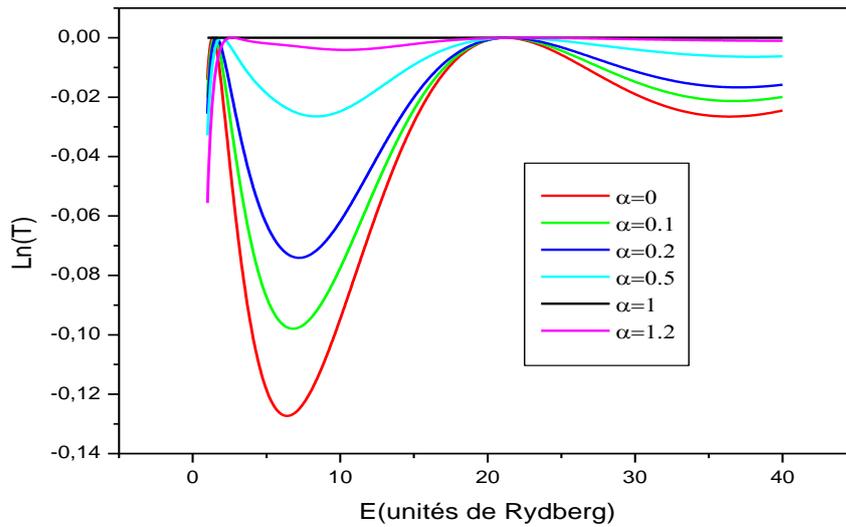
- Pour  $\alpha < 0$ , correspondant aux interactions électron-phonon, on observe qu'en augmentant  $\alpha$  en valeur absolue, la profondeur des vallées (correspondant au gap) diminue et la largeur des bandes permises augmentent quel que soit la valeur de l'interaction non-linéaire. Donc pour les potentiels en puits, l'interaction électron-phonon localise les états électroniques.



**Figure III.3 :** le coefficient de transmission  $\ln(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les potentiels en puits,  $\alpha < 0$ .

- Pour  $\alpha > 0$ , on remarque qu'il existe une intensité d'interaction critique  $|\alpha_c| = V_0$  ;  
Pour  $|\alpha| < \alpha_c$  : l'interaction électron-électron délocalise les états électroniques, et pour  $|\alpha| > \alpha_c$  : le comportement est inversé.

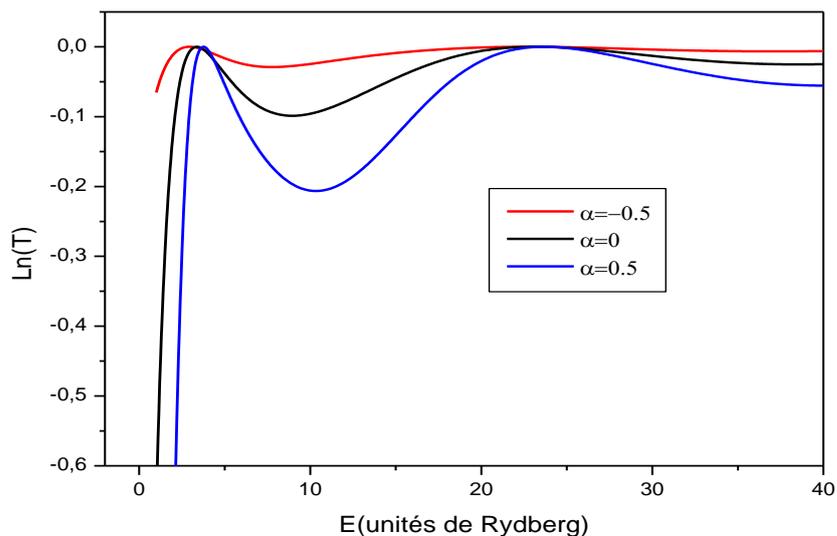
## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension



**Figure III.4 :** le coefficient de transmission  $\text{Ln}(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les potentiels en puits,  $\alpha > 0$ .

Pour comparer les effets des deux types d'interaction, nous traçons le spectre d'énergie pour  $\alpha < 0$  et  $\alpha > 0$  (pour  $|\alpha| < \alpha_c$ ).

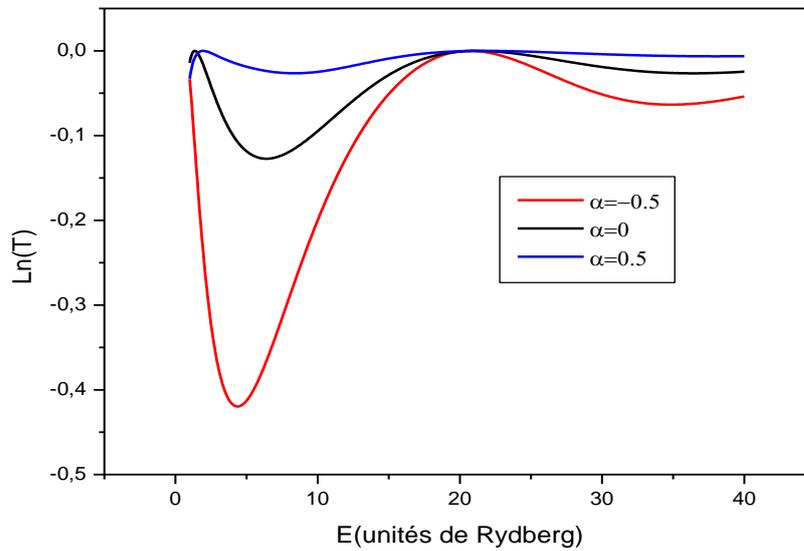
Dans le cas de potentiel en barrière (figure.III.5), la profondeur des vallées diminue et la largeur des bandes permises augmente pour  $\alpha < 0$  et vice versa pour  $\alpha > 0$ .



**Figure III.5 :** le coefficient de transmission  $\text{Ln}(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les Potentiels en barrières.

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

Le même comportement inverse est observé dans le cas de potentiel en puits (figure.III.6)



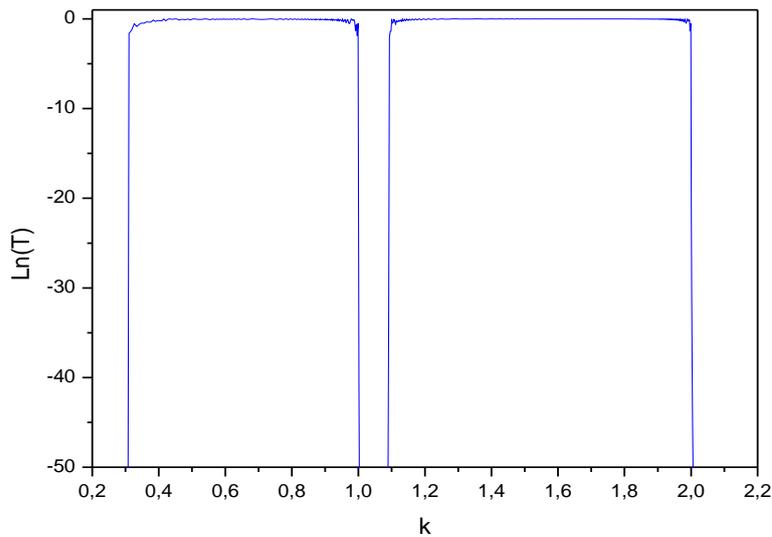
**Figure III.6 :** le coefficient de transmission  $\text{Ln}(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour les potentiels en puits.

Le tableau suivant résume le comportement des états électroniques de notre système ordonné:

| Barrières                       | Puits                             | $\alpha$     |
|---------------------------------|-----------------------------------|--------------|
| Délocalisés<br>$ \alpha  < V_0$ | Localisés                         | $\alpha < 0$ |
| Localisés                       | Délocalisés<br>$ \alpha  <  V_0 $ | $\alpha > 0$ |

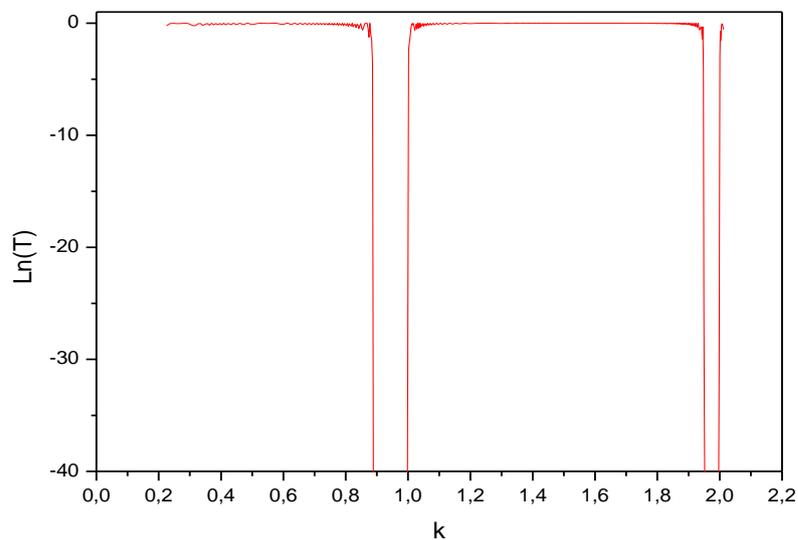
En augmentant le nombre des sites (atomes)  $N=500$ , les figures III.7 et III.8 montrent le spectre d'énergie pour  $V=1$  et  $V=-1$  successivement. On voit clairement la structure des bandes, des bandes permises où  $T=1$  séparées par des bandes interdites où  $T=0$ .

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension



**Figure III.7 :**  $\ln(T)$  en fonction du vecteur d'onde  $k$  ( $k = \sqrt{E}$ ) pour  $N= 500$ . Cas d'un système ordonné pour le potentiel en barrières dans le cas linéaire  $\alpha = 0$ .

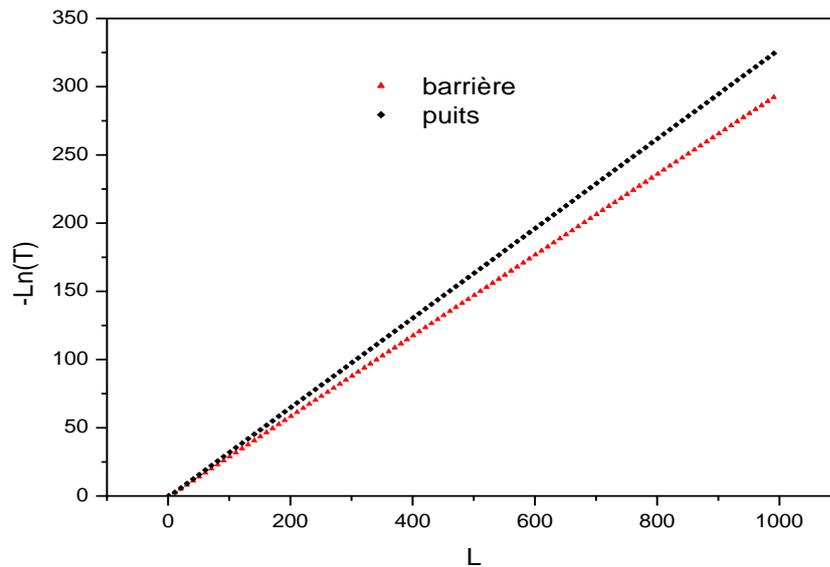
Sur ce diagramme, on observe la transmission dans la bande permise est quasi-totale. On remarque que la bande interdite, entre 1 et 1,05 la transmission est nulle.



**Figure III.8 :**  $\ln(T)$  en fonction du vecteur d'onde  $k$  pour  $N= 500$ . Cas d'un système ordonné pour le potentiel en puits.  $\alpha = 0$

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

Pour confirmer la nature des états électroniques dans ce système, nous avons calculé le coefficient de transmission  $-\ln(T)$  en fonction de la taille de système  $L$ . Nous avons pris pour valeurs des énergies  $E=11$  (pour les barrières) et  $E=9$  (pour les puits) correspondant à des énergies appartenant à la bande interdite à partir des figures 7 et 8.

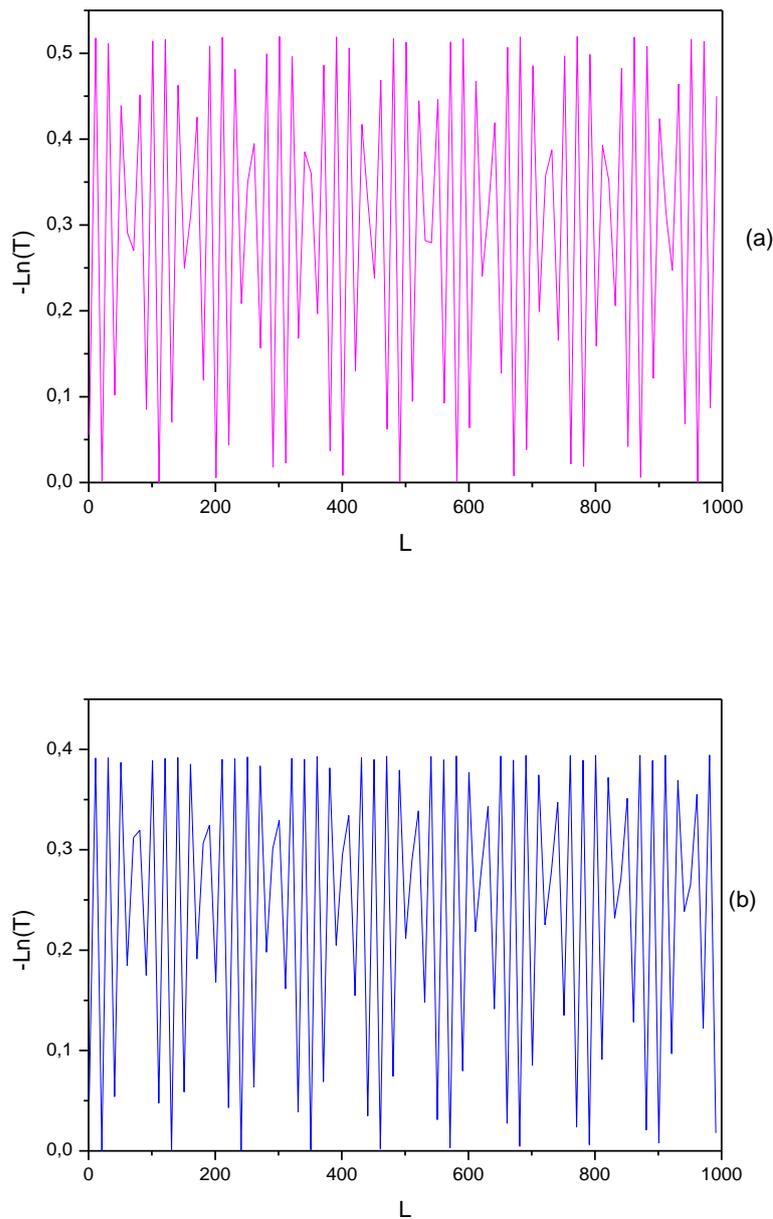


**Figure III.9 :** Coefficient de transmission  $-\ln(T)$  en fonction de la taille du système  $L$  pour le cas de potentiel barrière et puits.

La figure III.9 montre que la fonction d'onde décroît exponentiellement avec la taille du système,  $T \sim \exp(-L/\xi)$  ce qui indique que les états électroniques dans la bande interdite sont localisés.

Pour voir l'effet des interactions non-linéaires, nous avons calculé  $-\ln(T)$  pour  $\alpha < 0$  pour les barrières, et  $\alpha > 0$  pour les puits. Le résultat est montré sur les figures III-10.a et III-10.b. La fonction d'onde devient de type de Bloch. Les états sont donc étendus.

## Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension



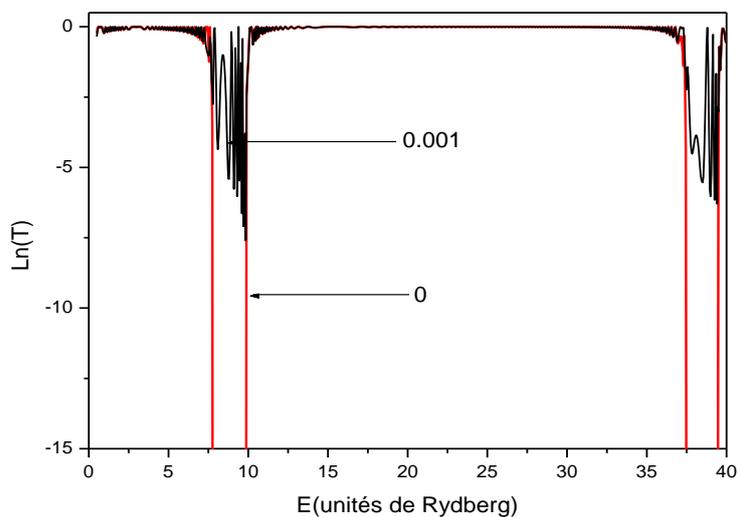
**Figure III.10:**  $-\text{Ln}(T)$  en fonction de la taille du système  $L$ , pour un système ordonné.

(a) Systèmes de potentiels en barrières avec  $\alpha=-0.2$ ; (b) les systèmes de potentiels en puits avec  $\alpha=0.3$

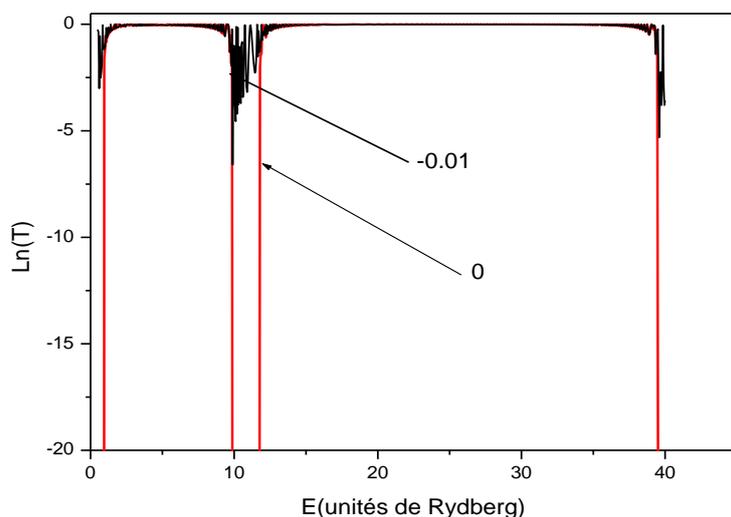
La nature du mode résonant est décrite à partir de la détermination du comportement de la fonction enveloppe correspondante sur Figure III.10. Le coefficient de transmission  $-\text{Ln}(T)$  en fonction de taille de système  $L$ , montre que le mode résonant possède une fonction enveloppe périodique à amplitude uniforme.

# Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension

## III.4 L'effet de l'interaction non-linéaire sur le coefficient de transmission :



**Figure III.11:**coefficient de transmission  $\text{Ln}(T)$  en fonction de l'énergie  $E$  pour le cas d'un potentiel en puits avec différentes valeurs de l'interaction non-linéaire ( $\alpha = 0$ , et  $\alpha > 0$ ).



**Figure III.12:**coefficient de transmission  $\text{Ln}(t)$  en fonction de l'énergie  $E$  dans le cas d'un potentiel en barrières avec différentes valeurs de l'interaction non-linéaire ( $\alpha = 0$ , et  $\alpha < 0$ ).

## **Etude de l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon sur les propriétés de transport d'un système ordonné à une dimension**

En introduisant les interactions non-linéaires, pour les potentiels en barrières (avec  $\alpha < 0$ ) ; la largeur de la bande permise augmente ainsi que la transmission dans la bande interdite indiquant une délocalisation des états électroniques. Le même comportement est observé dans le cas de potentiel en puits mais avec les interactions (électron-électron,  $\alpha > 0$ ).

### **III.5 Résumé :**

En résumé ; nous pouvons dire que pour les potentiels en barrières avec les interactions coulombiennes ( $\alpha > 0$ ), tous les états électroniques deviennent localisés quel que soit  $\alpha$ , le même comportement est observé dans le cas de potentiel en puits avec les interactions électron-phonon ( $\alpha < 0$ ).

La délocalisation des états électroniques est observée dans le cas de potentiel en barrière avec les interactions électron-phonon, et observée aussi dans le cas de potentiel en puits avec les interactions coulombiennes à condition que  $|\alpha| < |V_0|$

## Conclusion

Un des objectifs de ce travail consistait à utiliser la méthode de la matrice de transfert pour le calcul des propriétés de transport en utilisant l'équation de Schrödinger non-linéaire indépendante appliquée à un système unidimensionnel ordonné.

Dans un premier lieu, nous nous sommes intéressés aux deux modèles physique simple ; le modèle de Kronig-Penney avec un potentiel de largeur finie et de potentiel de pic  $\delta$ , et le modèle de liaison fort.

Nous sommes passés ensuite à calculer la transmission et la réflexion dans le cas ordonné. Nous avons choisi d'utiliser la méthode de la matrice de transfert pour décrire la diffusion électronique par un potentiel donné car elle permet facilement de relier les amplitudes entrantes dans le système à celles qui sortent dans le cas de présence d'un nombre élevé de barrières de potentiel comme nous l'avons vu au chapitre II.

En fin, nous avons étudié la propagation d'une onde électronique dans un système ordonné à une dimension en absence d'interactions non-linéaires. Plusieurs types de potentiels peuvent être considérés pour voir comment la structure de bande est modifiée en fonction des différents paramètres du système.

Nous avons observés une délocalisation ou une localisation des états électroniques dépendants du type de potentiel considéré et de type d'interaction introduite.

L'interaction électron-électron délocalise les états électroniques dans le cas d'un potentiel en puits, et localise ces états dans le cas d'un potentiel en barrière. à condition que  $|\alpha| < |V_0|$

Le même comportement inverse est observé dans le cas de l'interaction électron-phonon.

## Bibliographie

- [1]. F. Bloch , Z. phys. 52, 555 (1928)
- [2]. M.P. Marder, Condensed Matter physics, Wiley Interscience publication, New York (1999)
- [3]. Charles Kittel (trad. Nathalie Bardou, Évelyne Kolb), Physique de l'état solide [« Solid state physics »], 1998 [détail des éditions]
- [4]. [www.theo.phys.ulg.ac.be/wiki/uploads/c/c5/12-Kronig-Penney](http://www.theo.phys.ulg.ac.be/wiki/uploads/c/c5/12-Kronig-Penney)
- [5]. Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Physique des solides [détail des éditions]
- [6]. O. Madelung, Introduction to Solid State Physics, Springer, 1981. ISBN 0-387-08516-5
- [7]. Cohen-Tannoudji, C. B. Diu, and F. Lalce, *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York (1977).
- [8]. A. R. Gonzalez, Quantum wires in one dimension: disorder, electronic transport and dissipation, Tesis Doctoral, Universidad de Salamanca (2005).
- [9]. P. Markos, C.M. Soukoulis, Wave propagation: from electrons to photonic Crystals.
- [10]. *Walter Ashley Harrison (1989). Structure électronique et les propriétés des solides. Dover Publications. ISBN 0-486-66021-4.*
- [11]. Davies, John H. (1998) la physique des semiconducteurs de basse dimension: Une introduction. Cambridge, Royaume-Uni: Cambridge University Press ISBN .
- [12] F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, Physics Reports 512 (2012) 125–254.
- [13]. A. R. Gonzalez, *Quantum wires in one dimension: disorder, electronic transport and dissipation*, Tesis Doctoral, Universidad de Salamanca (2005).
- [14]. <http://www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/chimie-theorie-bandes-5040/>.
- [15]. Comme.Ref: G.Bastard, E.Emendez, L.L.Chang et L.Esaki , Phys.Rev.B28,3241 (1983); G.Gonzalaz, I.Delgadillo et A.Calderon, Sol.Stat Commun.98,357 (1996); S.M.A.Nimour, N.Zekri et R.Ouasti, Phys.Lett.A.226,393 (1997).

## Bibliographie

- [16]. P. Markos, C.M.Soukoulis, Wave propagation:from electrons to photonic Crystals.
- [17]. A. Galindo,P. Pascual, Quantum Mechanics. Vol 1. Springer, Berlin (1990).
- [18].J.A.Monsoriu F.R Villatoro, M.J.Marin ,J.F.Urchueguia,and P.Fernandez,Eur.J.Phys.26(2005) 603-610.
- [19]. Cohen-Tannoudji, C., B. Diu, and F. Lalce, *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York (1977).
- [20]. Mello, P. A., and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*. Oxford University Press, Oxford (2004).
- [21]. Cohen-Tannoudji, C., B. Diu, and F. Lalce, *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York (1977).
- [22].P. Markos, C.M.Soukoulis, Wave propagation:from electrons to photonic Crystals.
- [23].E. Merzbacher, Quantum Mechanic; 3nd. ed. John wiley & sons, new york (1998).
- [24]. E.Cota,J.V.José and M.Ya Abdel,Phys.Rev.B 32 (1985) 6157.
- [25]. Landau, L. D. and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*. Pergamon, Oxford (1984).
- [26] Flügge, S., *Practical Quantum Mechanics*. Springer, Berlin (1994, reprinted 1999).
- [27]. S.P. Bhattavharya,S.Sinha, Journal of Physical Sciences,Vol.12(2008),239-248.
- [28]. Economies, E. N., *Green's F functions in Quantum Physics*, 2nd ed. Springer, Berlin (1979).
- [29] Conference preceding on 'Fluctuations, nonlinearity and disorder in condensed matter and biological systems ', Heraklion, Crete (1996). Physica D113, 115-412 (1998), eds. G. P. Tsironis and E. N. Economou; 'Disorder with Nonlinearity', eds. F. Abdullaev, A.R. Bishop and S. Pnevmatikov, Springer-Verlag, Berlin, (1992); M. I. Molina and C. A. Bustamante , Am. J. Phys. 70, 67-70 (2002) M. I. Molina, Phys. Rev. B 67, 054202 (2003).
- [30] Y. Zhang, J. Kastrup, R. Klann, K. H. Ploog and H. T. Grahn, Phys. Rev. Lett. 77, 3001 (1996).
- [31] A. Sanchez, E. Macia and F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B 49, 147 (1994)

## **Bibliographie**