Mécanique quantique I

Séance d'exercices n°11 : Approximation WKB

L'équation de Schrödinger stationnaire ne peut être résolue analytiquement que dans des cas bien particuliers : potentiel carré, oscillateur harmonique, atome d'hydrogène etc. Quand les potentiels sont plus compliqués des approximations sont nécessaires. *L'approximation WKB* (Wentzel, Kramers, Brillouin) est l'une de ces approximations, utilisable dans un régime semi-classique. Ce régime est atteint quand la quantité de mouvement de la particule est suffisamment grande, c'est-à-dire quand la longueur d'onde De Broglie est petite par rapport à la longueur caractéristique de la variation du potentiel.

L'idée de l'approximation WKB est d'observer que pour un potentiel constant $V(\boldsymbol{x}) = V_0$ l'équation de Schrödinger a pour solution une onde plane

$$\psi(\boldsymbol{x}) = A_+ e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}},$$

où $\boldsymbol{p}$ est l'impulsion dirigée dans la direction de propagation, de norme $\sqrt{2m(E-V_0)}$. Quand le potentiel varie peu on choisi une fonction d'onde d'une forme similaire, donnée par

$$\psi(\boldsymbol{x}) = A(\boldsymbol{x})\, e^{\frac{i}{\hbar}S(\boldsymbol{x})}, \tag{1}$$

où $A(\boldsymbol{x})$ est une amplitude qui varie très lentement devant la phase $S(\boldsymbol{x})$. Nous allons maintenant développer les détails de cette approximation et les appliquer à un cas précis.

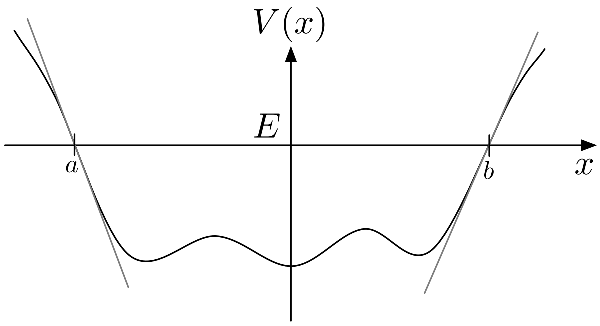

FIGURE 1 – Potentiel. Points de retournement classiques a et b.

1. (a) Injecter (1) dans l'équation de Schrödinger et obtenir deux équations différentielles pour $A(\boldsymbol{x})$ et $S(\boldsymbol{x})$, une correspondant à la partie réelle et une à la partie imaginaire. (Aide : $\nabla^2(AB) = 2(\nabla A).(\nabla B) + A\nabla^2(B) + \nabla^2(A)B$.)

   (b) On se place désormais dans le cas à une dimension. Montrer que l'équation correspondant à la partie imaginaire implique

$$A = \frac{C}{\sqrt{\frac{dS}{dx}}}, \tag{2}$$

---

http ://quic.ulb.ac.be, zvherstr@ulb.ac.be où C est une constante réelle. (Aide : poser $dS/dx = y(x)$).

(c) Le cas semi-classique correspond à négliger le terme $\hbar^2(d^2A/dx^2)/A$ par rapport au terme $(dS/dx)^2$. En déduire l'équation correspondant à la partie réelle.

(d) Exprimer $S(x)$ comme la solution de l'équation précédente et en déduire l'expression de la fonction d'onde $\psi(x)$ en utilisant $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$.

2. On observe que la fonction d'onde obtenue en 1.(d) diverge aux *points de retournement classiques* la vitesse s'annule et change le sens (quand $V(x)$ approche E). On se propose de trouver une autre solution applicable dans cette région. Au voisinage des points de retournement classiques (les points a et b sur la Fig. 1) on peut toujours utiliser une approximation linéaire de $V(x)$. Au point de retournement a on utilise le changement des variables $x - a \to x$ et $V(x) - E \to V$ et l'approximation au premier ordre nous donne $V = V'x$, où $V' < 0$.

   (a) Calculer $\int_0^x dx'\, p(x')/\hbar$.

   (b) Exprimer l'équation de Schrödinger au point a en posant la constante $c = (-2mV')^{1/2}/\hbar$.

   (c) Cette équation peut-être résolue analytiquement. Il y a deux solutions linéairement indépendantes données par des *fonctions d'Airy* (liées aux fonctions de Bessel). Physiquement seule la solution qui décrois à l'infinie est admissible. Loin de a cette solution peut-être approximé par

$$\psi(x) \propto x^{-1/4} \cos\left(\frac{2c}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{3}$$

   Mais loin de a, on avait déjà trouvé une solution à l'exercice 1. Il faut donc que les deux fonctions soient équivalentes. En combinant (3) et les résultats du point 1(d) et point 2(a) trouver $\psi(x)$.

   (d) En utilisant le même raisonnement appliqué au point b on trouve

$$\psi(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b dx'\, p(x') - \frac{\pi}{4}\right).$$

   Sachant que cette solution correspond à la même fonction qu'on a trouvé dans le point 2(c) et en utilisant la relation $\cos(x) = \cos(-x)$ calculer

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint dx\, p(x),$$

   où dans notre cas $\oint dx\, p(x) = 2\int_a^b dx\, p(x)$. Ce résultat correspond à la *quantification de Bohr-Sommerfeld.*

3. Trouver le spectre des énergies pour une particule dans un champs gravitationnel avec un "sol réfléchissant" dont le potentiel est donné par

$$V(z) = \begin{cases} g\,z, & z > 0 \\ \infty, & z < 0. \end{cases}$$

Remarque : Le même potentiel décrit le mouvement des électrons d'un semi-conducteur demi-infinie dans un champs électrique uniforme.