

Mécanique quantique I

Correction séance d'exercices 11 : Approximation WKB

Question 1.

(a) L'équation de SCHRÖDINGER est

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (1)$$

On sait que le Laplacien $\Delta = \nabla^2$ appliqué à un produit AB est donné par

$$\Delta(AB) = 2(\nabla A) \cdot (\nabla B) + A\Delta(B) + \Delta(A)B. \quad (2)$$

Sachant que la fonction d'onde est donnée par l'expression $\Psi(x) = A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$ (x est un vecteur), on obtient alors

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left(A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}\right) &= (E - V(x))A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left[2(\nabla A(x))(\nabla e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}) + A(x)\nabla^2(e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}) + e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}\nabla^2(A(x))\right] &= (E - V(x))A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{2i}{\hbar}e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}(\nabla A(x))(\nabla S(x)) + A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}\left(\frac{i}{\hbar}\nabla^2(S(x)) - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S(x))^2\right) + e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}\nabla^2(A(x))\right] &= (E - V(x))A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \\ [-2i\hbar(\nabla A(x))(\nabla S(x)) + A(x)(-i\hbar\nabla^2(S(x)) + (\nabla S(x))^2) - \hbar^2\nabla^2(A(x))] &= 2m(E - V(x))A(x) \\ A(\mathbf{x})(\nabla S(\mathbf{x}))^2 - i\hbar A(\mathbf{x})\Delta S(\mathbf{x}) - 2i\hbar(\nabla A(\mathbf{x})) \cdot (\nabla S(\mathbf{x})) - \hbar^2\Delta A(\mathbf{x}) &= 2m(E - V(\mathbf{x}))A(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

On en déduit alors deux équations différentielles (une pour la partie réelle et une pour la partie imaginaire) :

$$\begin{aligned} \text{réel : } (\nabla S(\mathbf{x}))^2 &= 2m(E - V(\mathbf{x})) + \hbar^2\frac{\Delta A(\mathbf{x})}{A(\mathbf{x})} \\ \text{imaginaire : } -\Delta S(\mathbf{x}) &= 2\frac{(\nabla A(\mathbf{x})) \cdot (\nabla S(\mathbf{x}))}{A(\mathbf{x})} \end{aligned}$$

(b) On se place maintenant à une dimension ($\mathbf{x} \rightarrow x$). Nos équations deviennent

$$\boxed{\text{réel : } S'^2(\mathbf{x}) = 2m(E - V(\mathbf{x})) + \hbar^2\frac{A''(\mathbf{x})}{A(\mathbf{x})},} \quad (3)$$

et

$$\boxed{\text{imaginaire : } -S''(\mathbf{x}) = \frac{2A'(\mathbf{x})S'(\mathbf{x})}{A(\mathbf{x})}.} \quad (4)$$

Posons

$$S'(x) = \frac{dS}{dx} \equiv y(x). \quad (5)$$

La partie imaginaire (4) de l'équation de SCHRÖDINGER devient donc

$$-\frac{dy}{dx} = 2\frac{dA/dx}{A}y.$$

En simplifiant les dx et en divisant les deux membres par $2y$, on trouve

$$-\frac{1}{2}\frac{dy}{y} = \frac{dA}{A}.$$

On intègre les deux membres :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\int\frac{dy}{y} &= \int\frac{dA}{A} \\ \Leftrightarrow -\frac{1}{2}\ln y &= \ln A + B, \end{aligned}$$

où B est une constante réelle. En utilisant la propriété des logarithmes $a \ln x = \ln x^a$, on a

$$\begin{aligned} \ln \frac{1}{\sqrt{y}} &= \ln A + B, \\ \Leftrightarrow e^{\ln 1/\sqrt{y}} &= e^{\ln A + B}, \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{y}} &= Ae^B. \end{aligned}$$

En définissant la constante $C \equiv e^{-B}$, et en remplaçant y par sa définition (5), on obtient finalement

$$\boxed{A = \frac{C}{\sqrt{\frac{dS}{dx}}}.} \quad (6)$$

(c) Si on néglige le terme $\hbar^2(d^2A/dx^2)/A$ devant $(dS/dx)^2$, la partie réelle (3) de l'équation de SCHRÖDINGER devient

$$\boxed{S'^2(x) = 2m(E - V(x)).} \quad (7)$$

(d) On peut déduire $S(x)$ de l'équation (7) :

$$S'(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))}.$$

La solution est donc

$$S(x) = \pm\int\sqrt{2m(E - V(x))}dx.$$

En définissant

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (8)$$

on trouve finalement

$$\boxed{S(x) = \pm\int p(x)dx.}$$

En injectant ce résultat ainsi que le résultat (6) dans l'expression de la fonction d'onde, on obtient

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{\pm} \frac{C_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x')dx'},} \quad (9)$$

où C_+ et C_- sont des constantes complexes à déterminer.

Question 2.

On fait les deux changements de variables et l'approximation suivants :

$$\begin{aligned} x - a &\rightarrow x \text{ ou encore } x \rightarrow x + a, \\ V(x) - E &\rightarrow V, \end{aligned} \tag{10}$$

$$V(x) = V'x \text{ où } V' < 0. \tag{11}$$

(a) En utilisant la définition (8) :

$$\int_0^x \frac{p(x')}{\hbar} dx' = \frac{1}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx'.$$

En utilisant le changement de variable(10) ainsi que l'approximation (11), on obtient

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{p(x')}{\hbar} dx' &= \frac{1}{\hbar} \int_0^x \sqrt{-2mV'x'} dx', \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{2}{3} (-2mV')^{1/2} x'^{3/2} \right]_0^x, \\ &= \frac{2}{3} \frac{(-2mV')^{1/2}}{\hbar} x^{3/2}. \end{aligned} \tag{12}$$

On définit la constante

$$c \equiv \frac{(-2mV')^{1/2}}{\hbar}. \tag{13}$$

En injectant dans l'expression (12), on trouve finalement

$$\boxed{\int_0^x \frac{p(x')}{\hbar} dx' = \frac{2c}{3} x^{3/2}.} \tag{14}$$

(b) À une dimension, l'équation de Schrödinger (1) est donnée par

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

Autour du point de retournement a , on peut effectuer le changement de variable (10) ainsi que l'approximation (11). En divisant les deux membres par $-\hbar^2/2m$, on obtient :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (-V'x) \psi(x).$$

On utilise alors la définition (13) pour obtenir l'équation de SCHRÖDINGER autour du point de retournement a :

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -c^2x\psi(x).} \tag{15}$$

(c) À partir de l'expression (9) et du résultat (12), la solution de l'équation de SCHRÖDINGER (1) peut s'écrire

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} e^{+i\frac{2c}{3}x^{3/2}} + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\frac{2c}{3}x^{3/2}}. \tag{16}$$

Or loin de a , la solution de l'équation de SCHRÖDINGER (15) peut être approximée par

$$\psi(x) \propto x^{-1/4} \cos\left(\frac{2c}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{17}$$

On va utiliser cet expression pour déterminer les paramètres de la solution (16). Premièrement, pour faire apparaître le cosinus, il suffit de choisir les constantes telles que

$$C_- = (C_+)^* . \quad (18)$$

De plus, on voit que l'argument du cosinus dans (17) est déphasé de $-\pi/4$, il faut donc

$$\boxed{C_+ = \rho e^{-i\pi/4}} , \quad (19)$$

avec ρ est une constante réelle à déterminer¹. Les relations (18) et (19) impliquent

$$\boxed{C_- = \rho e^{i\pi/4}} . \quad (20)$$

Finalement, il suffit de remarquer que

$$p(x) = \sqrt{2m(-V'x)} \sim x^{1/2} ,$$

ce qui nous permet immédiatement de voir que

$$\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sim x^{-1/4} ,$$

qui correspond bien au premier facteur de l'expression (17). En injectant les résultats (19) et (20) dans (9), on trouve finalement :

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right)} . \quad (21)$$

(d) En appliquant le même raisonnement au point b , on trouve

$$\psi(x) = \frac{\rho'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right) . \quad (22)$$

Or cette solution correspond à la même fonction qu'on a trouvé au point 2(c),

$$\psi(x) = \frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) . \quad (23)$$

Or, on sait que

$$\begin{cases} \cos(x + 2l\pi) = \cos(x) \\ \cos(x + [2l + 1]\pi) = -\cos(x) \end{cases} \quad \forall x, \quad l \in \mathbb{Z} \quad (24)$$

ce qui peut être résumé en

$$\cos(x + l\pi) = (-1)^l \cos(x), \quad \forall x, \quad l \in \mathbb{Z} . \quad (25)$$

Les équations (22) et (23) nous permettent d'écrire

$$\frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) = \frac{\rho'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right) , \quad (26)$$

ou

$$\frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) = \frac{\rho'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4} \right) . \quad (27)$$

1. On peut la déterminer à partir de la condition de normalisation : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$.

On a alors, on utilisant (25),

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4} + k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (28)$$

du moment qu'on fixe également

$$\rho = (-1)^k \rho', \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (29)$$

De (28), on déduit

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' = \pi \left(k + \frac{1}{2} \right), \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (30)$$

D'autre part, notons que s'il l'on inverse les bornes de l'intégrale dans (30), on doit aussi changer le signe de $p(x)$. En effet, si la particule qu'on décrit se déplace de a vers b avec une impulsion $p(x)$, elle se déplacera de b vers a avec une impulsion $-p(x)$. On a alors

$$\frac{1}{\hbar} \oint dx p(x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx p(x) + \frac{1}{\hbar} \int_b^a dx (-p(x)),$$

et donc

$$\frac{1}{\hbar} \oint dx p(x) = \frac{2}{\hbar} \int_a^b dx p(x) = 2\pi \left(k + \frac{1}{2} \right),$$

on trouve alors que

$$\boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx p(x) = k + \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{Z},} \quad (31)$$

ou encore (en utilisant (8))

$$\boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{Z}} \quad (32)$$

On voit que la relation (32) n'est satisfait que pour des valeurs discrètes de l'énergie $E_k = E_0, E_1, E_2, \dots$ associé aux nombres $k = 0, 1, 2, \dots$. Ces énergies sont en fait les approximations WKB des énergies des états liés.

Question 3.

D'après la relation (32), on a

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}, \quad (33)$$

ou

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}. \quad (34)$$

Si on regarde la Figure du potentiel, on voit que si la particule se déplace vers les x croissants, elle finit par rencontrer une barrière de potentiel $V(x)$, et qu'elle ne pourra passer cette barrière que si son énergie E_k est suffisante. L'intervalle qu'on prend ici, et qui correspond aux bornes de notre intégrale, correspond à la distance parcourue par la particule jusqu'à la barrière de potentiel. Si elle part d'une coordonnée $x = 0$ (donc on prend $a = 0$), la particule va jusqu'à une coordonnée $x = b_k$ qui est telle que

$$E_k = V(b_k) = gb_k, \quad (35)$$

et qui est la seconde borne de l'intégrale qu'on cherche à calculer. Si on effectue le changement de variable

$$y = \frac{E_k}{g} - x \quad \Rightarrow \quad dy = -dx, \quad (36)$$

la relation (34) devient

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^{b_k} dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2} \\
\Rightarrow & \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{2mg} \int_0^{b_k} dx \sqrt{\frac{E_k}{g} - x} = k + \frac{1}{2} \\
\Rightarrow & \frac{-\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \int_{E_k/g}^{E_k/g - b_k} dy \sqrt{y} = k + \frac{1}{2} \\
\Rightarrow & \frac{-\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \left[\frac{2}{3} y^{3/2} \right]_{E_k/g}^0 = k + \frac{1}{2} \\
\Rightarrow & \frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \left(\frac{E_k}{g} \right)^{3/2} = k + \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{37}$$

On obtient finalement

$$E_k = g \left[\frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2mg}} \left(k + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3} = \left[\frac{3}{2} \frac{\pi\hbar g}{\sqrt{2m}} \left(k + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3}. \tag{38}$$