Mécanique quantique I

Correction séance d'exercices 11 : Approximation WKB

Question 1.

(a) L'équation de Schrödinger est

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

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

$$\Delta(AB) = 2(\nabla A).(\nabla B) + A\Delta(B) + \Delta(A)B. \tag{2}$$

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

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

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

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

$$\text{imaginaire} : -\Delta S(\mathbf{x}) = 2\frac{(\nabla A(\mathbf{x})).(\nabla S(\mathbf{x}))}{A(\mathbf{x})}$$

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

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

et

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

Posons

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

http ://quic.ulb.ac.be, zvherstr@ulb.ac.be

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

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

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

$$\boxed{A = \frac{C}{\sqrt{\frac{dS}{dx}}}.} \tag{6}$$

(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

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

(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

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

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

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

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

Question 2.

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

$$x - a \to x \text{ ou encore } x \to x + a,$$
$$V(x) - E \to V, \tag{10}$$
$$V(x) = V'x \text{ où } V' < 0. \tag{11}$$

(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

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

On définit la constante

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

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

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

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 :

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

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

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

(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

$$C_- = (C_+)^* . \tag{18}$$

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

$$\boxed{C_+ = \rho e^{-\mathrm{i}\pi/4},} \tag{19}$$

avec ρ est une constante réelle à déterminer [1]. Les relations (18) et (19) impliquent

$$\boxed{C_- = \rho e^{\mathrm{i}\pi/4}.} \tag{20}$$

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 :

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

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

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

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

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

Or, on sait que

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

ce qui peut être résumé en

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

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

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

ou

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

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),

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

du moment qu'on fixe également

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

De (28), on déduit

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

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

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

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

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

ou encore (en utilisant (8))

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

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

Question 3.

D'après la relation (32), on a

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

ou

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

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

$$E_k = V(b_k) = g b_k, \tag{35}$$

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

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

la relation (34) devient

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

On obtient finalement

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