

## Mécanique quantique I

## Séance d'exercices n°12 : 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  $V(\mathbf{x}) = V_0$  l'équation de Schrödinger a pour solution une onde plane

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

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

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

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

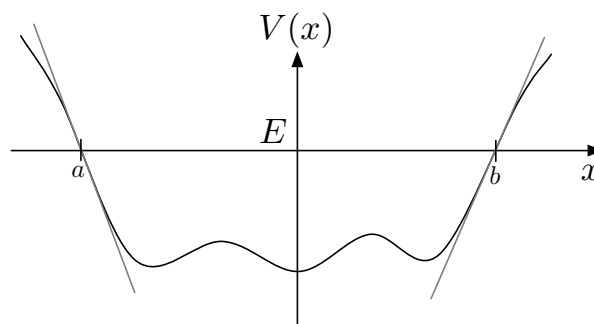


FIGURE 1 – Potentiel. Points de retournement classiques  $a$  et  $b$ .

1. (a) Injecter (1) dans l'équation de Schrödinger et obtenir deux équations différentielles pour  $A(\mathbf{x})$  et  $S(\mathbf{x})$ , une correspondant à la partie réelle et une à la partie imaginaire.
- (b) On se place désormais dans le cas à une dimension. Montrer que l'équation correspondant à la partie imaginaire implique

$$A = \frac{C}{\sqrt{\frac{dS}{dx}}}, \quad (2)$$

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  $x - a \rightarrow x$  et  $V(x) - E \rightarrow V$  et l'approximation au premier ordre nous donne  $V = V'x$ , où  $V' < 0$ .

- (a) Calculer  $\int dx p(x)/\hbar$ .
- (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 décroît à l'infini est admissible. Loin de  $a$  cette solution peut-être approximé par

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

où. On 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

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

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