

## Mécanique Quantique 1 — CORRIGÉ

### Séance d'exercices 12 : Approximation WKB

#### Question 1.

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 en 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 DE BROGLIE est petite par rapport à la longueur caractéristique de la variation de 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 générale la somme d'une onde plane se propageant vers la droite et d'une onde plane se propageant vers la gauche :

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

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

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

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.

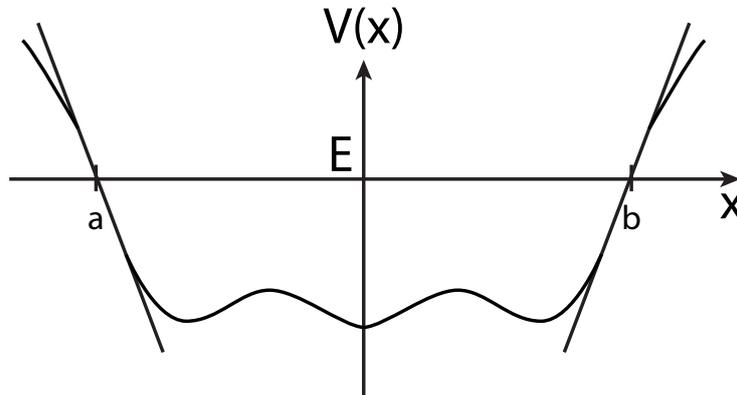


FIGURE 1 – Potentiel. Points de retournement classiques a et b.

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

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

où  $C$  est une constante réelle. (Aide : poser  $dS/dx = y(x)$ ).

- (c) Le cas semi-classique (approximation WKB) consiste 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  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ .
- (a) L'équation de SCHRÖDINGER est

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (3)$$

On sait que le Laplacien appliqué à un produit  $AB$  est donné par

$$\Delta(AB) = 2(\nabla A) \cdot (\nabla B) + A\Delta(B) + \Delta(A)B. \quad (4)$$

Sachant que la fonction d'onde est donnée par l'expression (1), on obtient alors

$$A(\mathbf{x})(\nabla S(\mathbf{x}))^2 - i\hbar\Delta S(\mathbf{x}) - 2i\hbar(\nabla A(\mathbf{x})) \cdot (\nabla S(\mathbf{x})) - \hbar^2\Delta A(\mathbf{x}) = 2m(E - V(\mathbf{x}))A(\mathbf{x}) \quad (5)$$

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

$$\boxed{\text{réel : } S'^2(\mathbf{x}) = 2m(E - V(\mathbf{x})) + \hbar^2 \frac{A''(\mathbf{x})}{A(\mathbf{x})},} \quad (6)$$

et

$$\boxed{\text{imaginaire : } -S''(\mathbf{x}) = \frac{2A'(\mathbf{x})S'(\mathbf{x})}{A(\mathbf{x})}.} \quad (7)$$

Posons

$$S'(x) = \frac{dS}{dx} \equiv y(x). \quad (8)$$

La partie imaginaire (7) 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 (8), on obtient finalement

$$\boxed{A = \frac{C}{\sqrt{\frac{dS}{dx}}}.} \quad (9)$$

(c) Si on néglige le terme  $\hbar^2(d^2A/dx^2)/A$  devant  $(dS/dx)^2$ , la partie réelle (6) de l'équation de SCHRÖDINGER devient

$$\boxed{S'^2(x) = 2m(E - V(x)).} \quad (10)$$

(d) On peut déduire  $S(x)$  de l'équation (10) :

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

La solution est donc

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

En définissant

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (11)$$

on trouve finalement

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

En injectant ce résultat ainsi que le résultat (9) dans l'expression de la fonction d'onde (1), on obtient

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{\pm} \frac{C_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x') dx'},} \quad (12)$$

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

## Question 2.

On observe que la fonction d'onde obtenue en 1(d) diverge aux points de retournement classiques où la vitesse s'annule et change de sens (quand  $V(x)$  approche  $E$ )<sup>1</sup>. 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  $\int_0^x dx' p(x')/\hbar$  en posant la constante  $c = (-2mV')^{1/2}/\hbar$ .

(b) Exprimer l'équation de SCHRÖDINGER au point de retournement  $a$  en utilisant à nouveau l'expression de la constante  $c$ .

---

1. En effet, on voit que quand  $V \rightarrow E$ ,  $p \rightarrow 0$  (voir éq. (11)), ce qui implique bien que (12) diverge.

- (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'infinie est admissible. Loin de  $a$ , cette solution peut être approximée par

$$\psi(x) \propto x^{-1/4} \cos\left(\frac{2c}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (13)$$

En combinant (13) 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

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

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.

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

$$x - a \rightarrow x \text{ ou encore } x \rightarrow x + a,$$

$$V(x) - E \rightarrow V, \quad (14)$$

$$V(x) = V'x \text{ où } V' < 0. \quad (15)$$

- (a) En utilisant la définition (11) :

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

En utilisant le changement de variable(14) ainsi que l'approximation (15), on obtient

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{p(x')}{\hbar} dx' &= \frac{1}{\hbar} \int_0^x \sqrt{-2mV'x'} dx', \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{2}{3} (-2mV')^{1/2} x'^{3/2} \right]_0^x, \\ &= \frac{2}{3} \frac{(-2mV')^{1/2}}{\hbar} x^{3/2}. \end{aligned} \quad (16)$$

On définit la constante

$$c \equiv \frac{(-2mV')^{1/2}}{\hbar}. \quad (17)$$

En injectant dans l'expression (16), on trouve finalement

$$\boxed{\int_0^x \frac{p(x')}{\hbar} dx' = \frac{2c}{3} x^{3/2}.} \quad (18)$$

(b) À une dimension, l'équation de Schrödinger (3) 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 (14) ainsi que l'approximation (15). 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 (17) pour obtenir l'équation de SCHRÖDINGER autour du point de retournement  $a$  :

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -c^2 x \psi(x).} \quad (19)$$

(c) À partir de l'expression (12) et du résultat (16), la solution de l'équation de SCHRÖDINGER (3) peut s'écrire

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} e^{+i\frac{2c}{3}x^{3/2}} + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\frac{2c}{3}x^{3/2}}. \quad (20)$$

Or loin de  $a$ , la solution de l'équation de SCHRÖDINGER (19) peut être approximée par

$$\psi(x) \propto x^{-1/4} \cos\left(\frac{2c}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (21)$$

On va utiliser cet expression pour déterminer les paramètres de la solution (20). Premièrement, pour faire apparaître le cosinus, il suffit de choisir les constantes telles que

$$C_- = (C_+)^*. \quad (22)$$

De plus, on voit que l'argument du cosinus dans (21) est déphasé de  $-\pi/4$ , il faut donc

$$\boxed{C_+ = \rho e^{-i\pi/4},} \quad (23)$$

avec  $\rho$  est une constante réelle à déterminer<sup>2</sup>. Les relations (22) et (23) impliquent

$$\boxed{C_- = \rho e^{i\pi/4}.} \quad (24)$$

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 (21). En injectant les résultats (23) et (24) dans (12), on trouve finalement :

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right).} \quad (25)$$

---

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

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

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

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

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

Or, on sait que

$$\begin{cases} \cos(x + 2l\pi) = \cos(x) \\ \cos(x + [2l + 1]\pi) = -\cos(x) \end{cases} \quad \forall x, \quad l \in \mathbb{Z} \quad (28)$$

ce qui peut être résumé en

$$\cos(x + l\pi) = (-1)^l \cos(x), \quad \forall x, \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (29)$$

Les équations (26) et (27) nous permettent d'écrire

$$\frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\rho'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right), \quad (30)$$

ou

$$\frac{\rho}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\rho'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right). \quad (31)$$

On a alors, on utilisant (29),

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4} + k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (32)$$

du moment qu'on fixe également

$$\rho = (-1)^k \rho', \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (33)$$

De (32), on déduit

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' = \pi \left(k + \frac{1}{2}\right), \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (34)$$

D'autre part, notons que s'il l'on inverse les bornes de l'intégrale dans (34), 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

$$\boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx p(x) = k + \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{Z},} \quad (35)$$

ou encore (en utilisant (11))

$$\boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{Z}} \quad (36)$$

On voit que la relation (36) 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.

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

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

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

D'après la relation (36), on a

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}, \quad (37)$$

ou

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2}. \quad (38)$$

Si on regarde la Figure 1, 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

$$E_k = V(b_k) = gb_k, \quad (39)$$

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

$$y = \frac{E_k}{g} - x \quad \Rightarrow \quad dy = -dz, \quad (40)$$

la relation (38) devient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^{b_k} dx \sqrt{2m(E_k - V(x))} = k + \frac{1}{2} \\ \Rightarrow & \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{2mg} \int_0^{b_k} dx \sqrt{\frac{E_k}{g} - x} = k + \frac{1}{2} \\ \Rightarrow & \frac{-\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \int_{E_k/g}^{E_k/g - b_k} dy \sqrt{y} = k + \frac{1}{2} \\ \Rightarrow & \frac{-\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \left[ \frac{2}{3} y^{3/2} \right]_{E_k/g}^0 = k + \frac{1}{2} \\ \Rightarrow & \frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mg}}{\pi\hbar} \left( \frac{E_k}{g} \right)^{3/2} = k + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (41)$$

On obtient finalement

$$E_k = \frac{1}{g} \left[ \frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2mg}} \left( k + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3}. \quad (42)$$