C; L'approche semi-classique : Approximation WKB

2.1 Etablissement de l'ansatz WKB

On considère une solution de l'équation de SCHRÖDINGER de la forme : (à une dimension)

$$\Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)} \tag{2}$$

Avec $\sigma(x)$ une fonction de la variable de position.

En l'injectant dans l'équation de SCHRÖDINGER, on obtient donc l'équation différentielle suivante pour σ :

$$\frac{i\hbar}{2m}\sigma'' - \frac{1}{2m}\sigma'^2 + E - V = 0 \tag{3}$$

L'approximation WKB, du nom des physiciens *Wentzel*, *Kramers* et *Brillouin* est une résolution approchée de cette équation. À la limite classique, la fonction d'onde oscille très rapidement, ce qui revient à faire tendre $\hbar$ vers 0. Dès lors, il est légitime de réécrire σ sous la forme d'une série de puissances de $\hbar$.

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + (\frac{\hbar}{i})^2\sigma_2 + ... + (\frac{\hbar}{i})^n\sigma_n \tag{4}$$

C'est le nombre de termes du développement qui va déterminer la précision de l'approximation. Traitons en premier lieu le cas $\sigma = \sigma_0$ [1]. On réécrit l'équation (3)de la forme suivante :

$$\frac{i\hbar}{2m}\sigma_0'' - \frac{1}{2m}\sigma_0'^2 + E - V = 0 \tag{5}$$

À la limite classique, on a $\hbar$ qui tend vers 0. On ramène donc l'équation précédente à ceci :

$$\frac{-1}{2m}\sigma_0'^2 + E - V = 0 \tag{6}$$

On obtient donc une équation pour σ_0' :

$$\sigma_0' = \pm\sqrt{2m(E - V)} \tag{7}$$

Et ainsi il en découle une équation pour σ_0 :

$$\sigma_0 = \pm \int \sqrt{2m(E - V)}dx = \int pdx \tag{8}$$

1. Ordre 0 de l'approximation

Belghobsi Zouina

On identifie $\sqrt{2m(E-V)}$ à l'impulsion classique de la particule.

Il faut bien comprendre que cette expression n'a de sens que si l'on néglige le terme de l'équation (5) en $\hbar$ et donc celui-ci doit vérifier :

$$\frac{i\hbar}{2m}\sigma_0'' \ll \frac{1}{2m}\sigma_0'^2 \tag{9}$$

$$\frac{\sigma_0'^2}{\sigma_0''} \gg \hbar \tag{10}$$

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{\sigma_0'}\right)\right| \ll \frac{1}{\hbar} \tag{11}$$

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)\right| \ll 1 \tag{12}$$

On a donc établi une condition quantitative pour la validité de l'approximation. Physiquement, elle traduit le fait que la longueur d'onde de la fonction d'onde doit très peu varier sur des distances équivalentes à elle-même. L'approximation sera donc valide seulement pour certaines morphologies du potentiel. Regardons à présent l'expression de la fonction d'onde à l'ordre 1, σ s'écrit cette fois-ci :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 \tag{13}$$

En insérant cette expression dans l'équation (3), et en négligeant cette fois-ci les termes d'ordres supérieurs ($\hbar^2$), il vient :

$$\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\sigma_0''}{2} + \sigma_0'\sigma_1'\right) - \frac{1}{2m}\sigma_0'^2 + E - V = 0 \tag{14}$$

Puisque l'on connaît déjà les solutions de (6), l'équation se ramène à :

$$\sigma_0'\sigma_1' + \frac{\sigma_0''}{2} = 0 \tag{15}$$

On peut donc en déduire une expression de σ_1 :

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{p'}{2p} \tag{16}$$

$$\sigma_1 = \frac{-1}{2}\ln(p) + cte \tag{17}$$

Il vient donc finalement que la fonction d'onde $\Psi(x)$ peut être réécrite de la manière qui suit :

$$\Psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p dx} \tag{18}$$

Avec c_1 une constante de normalisation

On remarque maintenant que la phase est affublée d'un coefficient en $\frac{1}{\sqrt{p}}$. Il est intéressant de constater que si l'on prend le module carré $|\Psi(x)|^2$ de la fonction [2], celui-ci est en $\frac{1}{p}$. On retrouve alors un résultat de la physique statistique où la probabilité de trouver la particule en un élément de distance dx est proportionnel à l'inverse de sa vitesse.

Dans les régions de l'espace classiquement interdites ($E < V$), la fonction p est imaginaire pure, et on a donc une exponentielle réelle : [1]

$$\Psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p}}e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int |p|dx} \tag{19}$$

2. Probabilité de présence de la particule entre x et $x + dx$

Belghobsi Zouina

2.2 Méthode WKB de la phase stationnaire

La fonction d'onde généralise donc le mouvement libre d'une particule. Elle n'est cependant pas satisfaisante aux points de rebroussement x_0 et $-x_0$ où $p = 0$ et où donc la fonction d'onde diverge. MASLOV, un physicien russe du XX^{eme} siècle contourna ce problème en remarquant qu'on pouvait lever la singularité en effectuant le raccordement de la fonction d'onde dans l'espace des phases (p, x). [2]

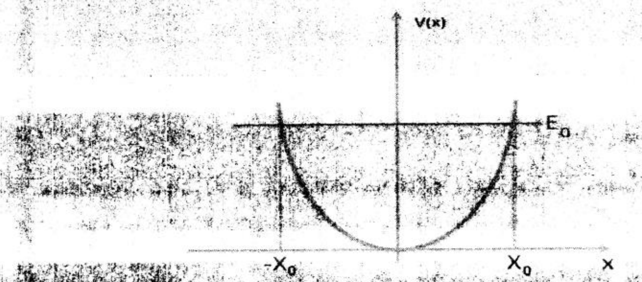

FIGURE 2.1 - Puits de potentiel harmonique

Pour passer d'une représentation à l'autre, on donne les deux formules suivantes :

$$\boxed{\widehat{\Psi(p)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{-i}{\hbar}xp}\Psi(x)dx} \tag{20}$$

Où $\widehat{\Psi(p)}$ représente la transformée de Fourier de $\Psi(x)$

$$\boxed{\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{i}{\hbar}xp}\widehat{\Psi(p)}dp} \tag{21}$$

Le problème est que l'on ne peut en général pas exactement calculer ces expressions mais puisque la fonction d'onde WKB est une approximation en elle-même, on peut cependant obtenir une estimation. On accomplit cela à l'aide de la méthode de la phase stationnaire. En effet, lorsque l'on a une intégrale du type :

$$I = \int A(x)e^{is\Phi(x)}dx \tag{22}$$

Avec s un paramètre réel très grand (dans notre cas : $s = \frac{1}{\hbar}$), la phase de la fonction oscille très rapidement. Les contributions notables pour l'intégrale sont donc près des points x_0 où $\Phi'(x_0) = 0$ (qui correspondent aux endroits où la phase oscille moins rapidement). On peut donc effectuer un développement limité de Φ autour de x_0, et on obtient :

$$I \approx \int A(x)e^{is(\Phi(x_0)+\frac{1}{2}\Phi''(x_0)\delta x^2)}dx \tag{23}$$

Avec $\delta x.\Phi'(x_0) = 0$

$$I \approx \int A(x) e^{is(\phi(x_0)+\frac{1}{2}\phi''(x_0)\delta x^2)} dx.$$

Si dans le voisinage de x_0, l'amplitude $A(x)$ varie lentement au regard de l'exponentielle, on peut approximer $A(x)$ par $A(x_0)$ et ainsi le sortir de l'intégrale précédente. Celle-ci devient alors :

$$I \approx A(x_0)e^{is\Phi x_0} \int A(x)e^{\frac{1}{2}is\Phi''(x_0)(x-x_0)^2}dx \tag{24}$$

$$I \approx A(x_0)\, e^{is\phi(x_0)} \int A(x)\, e^{\frac{1}{2}is\phi''(x_0)(x-x_0)^2} dx$$

Belghobsi Zouina