Chapitre 2

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

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 :

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

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

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

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

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 :

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

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 $x + dx$