



UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS
PROJET TUTEURÉ DE LICENCE DE PHYSIQUE

ANNÉE 2015-2016

Méthode approchée de résolution de
l'équation de Schrödinger :
L'approximation WKB

Auteurs :

Masayoshi ITO
Jérémy PERDIGON
Anthony SALSI

Encadrant :

Mathias ALBERT

Projet réalisé à l' *Institut Non linéaire de Nice*



17 mai 2016

Sommaire

1	Avant-propos	1
2	L'approche semi-classique : Approximation WKB	2
2.1	Etablissement de l'ansatz WKB	2
2.2	Méthode WKB de la phase stationnaire	4
3	Application aux barrières de potentiel	6
3.1	Règle de quantification de Bohr-Sommerfeld	6
3.1.1	Quantification de l'énergie	6
3.1.2	Représentation d'Husimi	8
3.2	Franchissement d'une barrière de potentiel	9
3.2.1	L'effet tunnel	9
3.2.2	L'effet tunnel avec WKB	10
3.3	Dédoublment des niveaux d'énergie dans les doubles puits symétriques	11
4	Conclusion	14
	Références bibliographiques	15

Chapitre 1

Avant-propos

La mécanique quantique est l'étude des systèmes physiques à l'échelle microscopique. La description de ces systèmes passe nécessairement par la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER. Cette équation, du même nom que son inventeur Erwin SCHRÖDINGER, établie en 1926, est la relation fondamentale de la mécanique quantique. Elle est définie par :

$$H\Psi = E\Psi \tag{1}$$

*Avec Ψ étant la fonction d'onde associée à l'état de la particule
 $H = \frac{P^2}{2m} + V$ l'opérateur hamiltonien qui décrit cette évolution*

Celui-ci est formé par la somme de l'opérateur quantité de mouvement P ($P^2 = -\hbar^2\Delta$) où Δ est le laplacien scalaire, et de l'opérateur V , qui est en fait une fonction d'un opérateur sur la position.

Cette équation aux dérivées partielles, du second ordre, est linéaire et homogène. Celle-ci n'est pas triviale à résoudre dans le cas de potentiels complexes, cas mis à part de résolution numérique. Il existe cependant une méthode approchée de résolution, l'approximation WKB, du nom des physiciens *Wentzel, Kramers et Brillouin*. Cette approximation repose sur le fait que l'on peut approximer les solutions de l'équation de SCHRÖDINGER par une fonction comportant des quantités usuellement classiques, pour peu que le potentiel ne varie pas fortement sur des distances de l'ordre de la longueur d'onde λ .

Le but de cet article est de fournir une vue d'ensemble des possibilités qu'offre la méthode de résolution WKB. On s'attachera donc dans un premier temps à la définir, à lui associer une condition quantitative quant à sa validité, avant de justifier son utilisation à travers quelques exemples.

Dans un même temps, il sera intéressant d'expliquer comment nous pouvons retrouver des propriétés de mécanique classique en partant d'une approche quantique. Pour cela, nous regarderons, par le biais de certaines théories, quelles conditions sont nécessaires pour observer ce rapprochement.

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)

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

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 :

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

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 .

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n\sigma_n \quad (4)$$

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 :

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

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

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

On obtient donc une équation pour σ_0' :

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

Et ainsi il en découle une équation pour σ_0 :

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

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 :

$$\frac{i\hbar}{2m}\sigma_0'' \ll \frac{1}{2m}\sigma_0'^2 \quad (9)$$

$$\frac{\sigma_0'^2}{\sigma_0''} \gg \hbar \quad (10)$$

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

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

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 :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 \quad (13)$$

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

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

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

$$\sigma_0'\sigma_1' + \frac{\sigma_0''}{2} = 0 \quad (15)$$

On peut donc en déduire une expression de σ_1 :

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = \frac{-p'}{2p} \quad (16)$$

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

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

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

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 fonction², 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]

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

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

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]

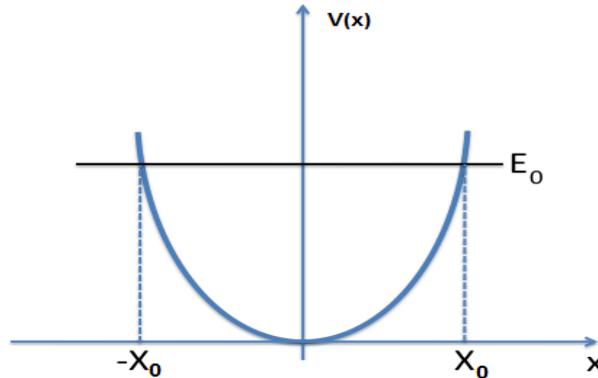


FIGURE 2.1 - Puits de potentiel harmonique

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

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

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

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

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 :

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

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 :

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

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

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 :

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

En utilisant la formule de l'intégrale de Fresnel :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2ia}} dx = \sqrt{ia} = |a|^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{\pi}{4} \frac{a}{|a|}} \quad (25)$$

On obtient finalement :

$$I \approx A(x_0) \left| \frac{2\pi}{s\Phi''(x_0)} \right|^{\frac{1}{2}} e^{is\Phi(x_0) \pm i\frac{\pi}{4}} \quad (26)$$

Où \pm correspond au signe de la phase $s\Phi''(x_0)$

Appliquons maintenant cette méthode à l'équation (20) :

$$\widehat{\Psi}(p) = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \frac{dx}{|p(x)|^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} (\int_x^{x_0} p dx - px)} \quad (27)$$

On identifie :

$$A(x) = \frac{1}{|p(x)|^{\frac{1}{2}}} \quad (28)$$

Puis :

$$\Phi(x) = \int_x^{x_0} p dx - px \quad (29)$$

On a :

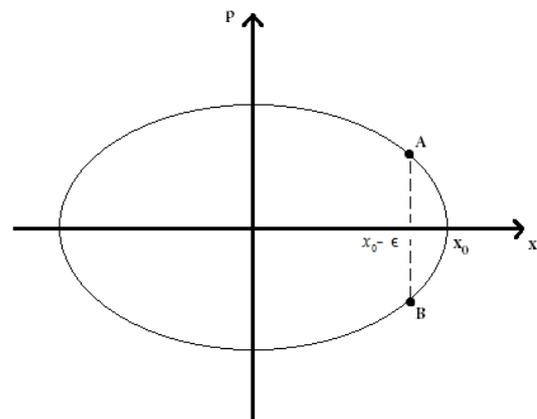
$$A(x_0) = \frac{1}{|p(x_0)|^{\frac{1}{2}}} \quad (30)$$

$$\Phi''(x_0) = p'(x_0) \quad (31)$$

Ainsi, en utilisant l'équation (27), on obtient finalement :

$$\widehat{\Psi}(p) = \frac{C}{|p(x_0)p'(x_0)|^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \Phi(x_0) + i\frac{\pi}{4} \text{sgn}[\Phi''(x_0)]} \quad (32)$$

Dans la représentation p , le passage de A à B ne pose pas de problème, il n'y a pas de singularité. Suivant l'expression de $\widehat{\Psi}(p)$, on a $\widehat{\Psi}(p_B) = \widehat{\Psi}(p_A) e^{\pm i\frac{\pi}{2}}$ (en effet, la dérivée seconde change de signe en x_0). En effectuant la transformée de Fourier inverse, on repasse en représentation x , on a $\Psi_B(x) = \Psi_A(x) e^{\pm i\frac{\pi}{2}}$. La fonction d'onde, au point de rebroussement, subit donc un déphasage de $\pm\frac{\pi}{2}$. Celui-ci est indépendant de la forme du potentiel.



Chapitre 3

Application aux barrières de potentiel

3.1 Règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

3.1.1 Quantification de l'énergie

Les premières expériences sur les atomes au début du XX^{eme} siècle avaient permis de mettre au jour la nature discrète des niveaux d'énergie et il fallait bâtir une théorie permettant d'en rendre compte. Jusqu'à présent, la mécanique classique prévoyait un continuum de valeurs possibles. On peut représenter ces niveaux d'énergie par une trajectoire dans l'espace des phases (p, x) . En effet, l'énergie d'un système périodique s'écrit en général :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (33)$$

Dans le cas d'un oscillateur harmonique, une particule évoluant à une dimension sera soumis à un potentiel de la forme :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (34)$$

L'énergie de ce système se réécrit donc :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (35)$$

On obtient alors une courbe paramétrée par p et x pour chaque valeur de E . Ces courbes ont la forme d'une ellipse. L'aire embrassée par cette courbe représente l'action de la particule.

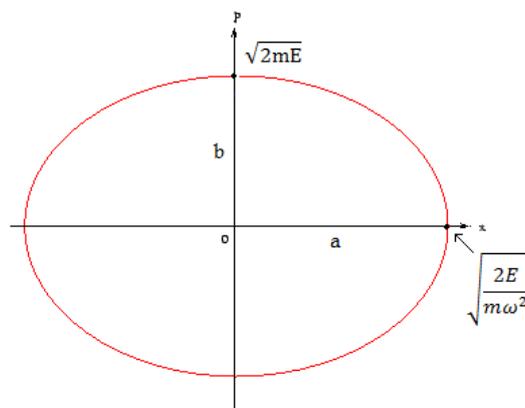


FIGURE 3.1 – Trajectoire dans l'espace des phases de l'oscillateur harmonique

Lorsque $p = 0$, on a $x = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$, et cette distance équivaut au demi-grand axe a de l'ellipse. Par raisonnement analogue, lorsque $x = 0$, on obtient $p = \sqrt{2mE}$, ce qui correspond au demi-petit axe b de l'ellipse. La surface de l'ellipse étant $S = \pi ab$, on obtient alors :

$$S = \frac{2E}{\omega} \pi \quad (36)$$

BOHR et SOMMERFELD ont admis que seules certaines énergies sont tolérées, celles dont l'aire de la trajectoire associée, et donc l'action, sont des multiples entier de h . On obtient donc la condition suivante :

$$\oint p dx = nh \quad (37)$$

Ainsi, comme dit précédemment, l'aire de l'ellipse représentant ici l'action de la particule, on a finalement :

$$\frac{2E}{\omega} \pi = nh \quad (38)$$

Et on a alors une équation pour E :

$$E = \frac{h}{2\pi} n\omega = n\hbar\omega \quad (39)$$

On retrouve donc bien une énergie quantifiée. Cette condition, autorise l'existence d'un nombre restreint de trajectoires, associées aux valeurs discrètes de E . [3]

On peut retrouver cette condition de quantification avec la fonction WKB. En effet, cette quantification vient de l'existence de la phase de la fonction d'onde. Ainsi le critère d'existence de celle-ci est défini par sa capacité à interférer constructivement avec elle-même. De ce fait, si la particule se déplace le long d'une trajectoire fermée, sa fonction d'onde doit revenir à la même valeur, donc à une phase de 2π près ($e^{2i\pi} = 1$). En dépit du comportement expliqué au chapitre suivant, la fonction d'onde subit également un déphasage de $\pm\frac{\pi}{2}$ à chaque fois qu'elle rencontre un point de rebroussement. [2] La condition de quantification s'écrit donc :

$$\frac{1}{\hbar} \oint p(x) - m\frac{\pi}{2} = 2n\pi \quad (40)$$

Avec m le nombre de points de rebroussement du système

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, $m = 2$. On en déduit la formule pour l'énergie suivante :

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (41)$$

Car $\oint p dx = \frac{2\pi E}{\omega}$ Qui s'avère être la formule exacte de l'énergie d'un oscillateur harmonique.

3.1.2 Représentation d'Husimi

En 1940, Kôdi HUSIMI introduisit une représentation de la densité de probabilité d'un état quantique dans l'espace des phases (base de paquets d'ondes gaussiens de largeur minimale $\Delta x \Delta p \approx \hbar$) pour différents niveaux d'énergie. À l'aide d'une simulation numérique, voici ce que nous obtenons pour certains nombres n :

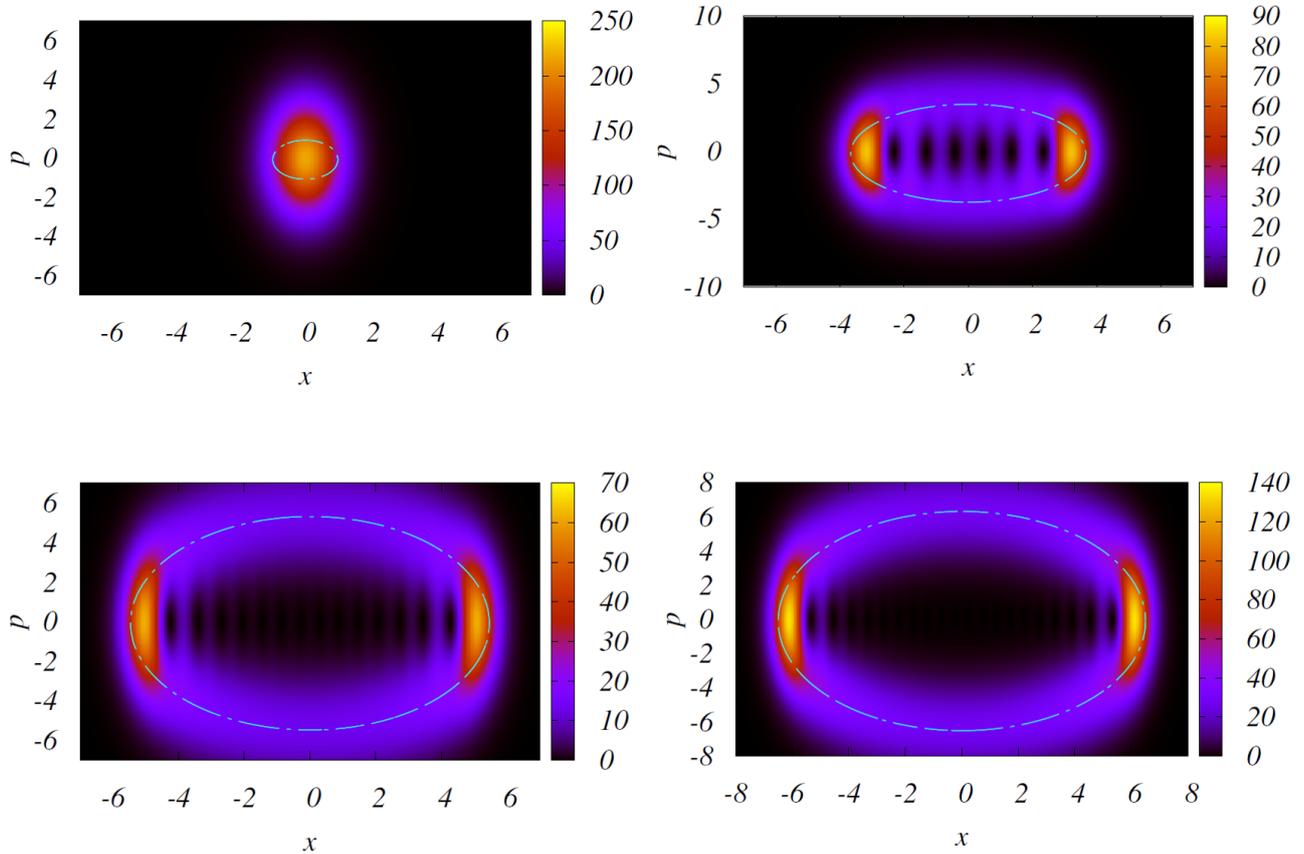


FIGURE 3.2 – Sur les figures, un trait dessinant une ellipse a été ajouté afin que l'on puisse remarquer l'évolution de la densité de probabilité de la fonction d'onde vers cette forme. On distingue bien une certaine différence de probabilité de présence dans l'espace des phases entre les différents niveaux n : **en haut à gauche : $n=0$, en haut à droite : $n=6$, en bas à gauche : $n=14$ et en bas à droite : $n=20$.**

On remarque que contrairement à la représentation classique, la courbe laisse place à un nuage de probabilité et l'aire n'est plus définie (à cause du $\Delta x \Delta p \approx \hbar \neq 0$). Cependant, cette dispersion étant constante, elle va se diluer dans l'aire de l'ellipse au fur et à mesure que l'énergie augmente (et donc que l'ellipse grandit). En effet, plus n va croître, plus l'énergie de la particule va augmenter. Comme nous pouvons le voir sur les figures, pour des niveaux d'énergie très grands, la densité de probabilité de présence de la particule se concentrera de plus en plus sur les bords de l'ellipse. Ainsi, pour de telles énergies, la densité de probabilité de présence de la particule va finalement tendre à dessiner la trajectoire de cette particule dans l'espace des phases.

HUSIMI retrouve donc les résultats énoncés par BOHR et SOMMERFELD concernant la forme elliptique de la densité de probabilité de présence d'une particule dans l'espace (p, x) , et prouve dans un même temps que pour des hautes énergies, l'état de la particule va tendre vers un comportement classique.

3.2 Franchissement d'une barrière de potentiel

3.2.1 L'effet tunnel

En mécanique classique, lorsqu'un objet fait face à un obstacle, celui-ci n'aura aucune chance de passer à travers. Mais en mécanique quantique, les choses se passent d'une tout autre manière. En effet, lorsqu'un objet quantique (comme un électron), est envoyé contre une barrière de potentiel. Celui-ci ayant une énergie inférieure à la valeur du potentiel de la barrière, on s'attendrait à ce que l'électron soit totalement réfléchi par la barrière. Or, on observe finalement que de l'autre côté de la barrière, la densité de probabilité de l'électron n'est pas nulle.

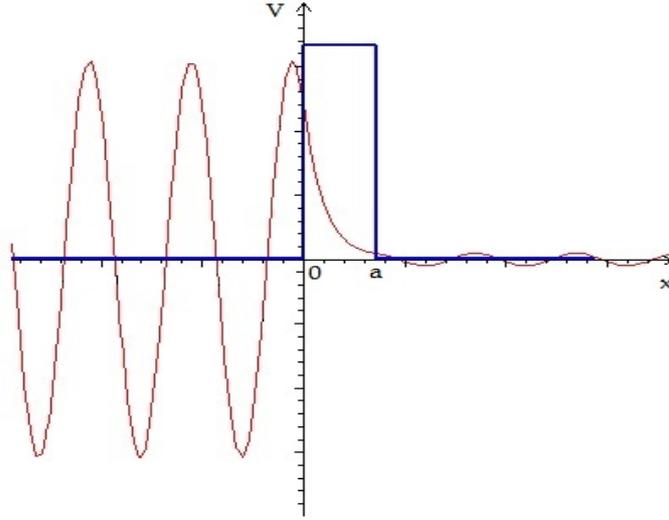


FIGURE 3.3 – Représentation de la fonction d'onde $\Re[\Psi(x)]$ aux abords d'une barrière de potentiel de largeur finie

La probabilité de traverser la barrière de potentiel va dépendre de l'extension spatiale de la barrière. En effet, plus celle-ci sera large, plus la densité de probabilité de trouver l'électron après le passage de la barrière se rapprochera de 0. Sur la partie de gauche de la figure (3.3) est représenté le phénomène d'interférence entre la partie incidente de l'onde et la partie réfléchie. En reprenant l'équation de Schrödinger :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\Psi(x) = 0 \quad (42)$$

En posant $V = 0$ dans cette partie, l'état de l'électron est donc décrit par la fonction d'onde suivante :

$$\Psi_g(x) = Ae^{ik_g x} + Be^{-ik_g x} \quad (43)$$

$$\text{Avec } k_g = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Dans la partie centrale, c'est à dire au sein de la barrière, le potentiel vaut cette fois-ci une valeur quelconque V_0 supérieure à l'énergie de l'électron. La forme de la fonction d'onde devient alors, toujours en s'appuyant sur l'équation de SCHRÖDINGER :

$$\Psi_c(x) = Ce^{k_c x} \quad (44)$$

$$\text{Avec } k_c = \sqrt{\frac{2m[V_0 - E]}{\hbar^2}}$$

Enfin, à droite de la barrière, c'est à dire si l'électron parvient à passer la barrière de potentiel, la fonction d'onde devrait avoir le même comportement que la partie de gauche, mais avec une amplitude moindre. On a alors :

$$\Psi_d(x) = De^{ik_g x} + Ee^{-ik_g x} \quad (45)$$

La fonction d'onde de l'électron, satisfaisant l'équation de SCHRÖDINGER dans chaque cas, obéit donc à la condition de continuité : aux points de rebroussement (ici aux points $x = 0$ et $x = a$), la fonction d'onde est égale à sa dérivée première. C'est de cette manière, après quelques calculs longs qui seront détaillés dans notre site web, que l'on en déduit les coefficients A , B , C , D et E . C'est ainsi que l'on introduit les coefficients de réflexion R et de transmission T , correspondant respectivement au module carré du rapport entre B et A , et entre D et A . Ici, nous nous intéresserons surtout au coefficient de transmission : si sa valeur vaut 0, alors l'onde incidente est totalement réfléchi sur la barrière, en revanche, si celui-ci vaut 1, alors l'onde incidente est entièrement transmise. Dans notre cas, le coefficient de transmission s'écrit de la sorte :

$$T = \left| \frac{D}{A} \right|^2 = \frac{16E[V_0 - E]}{V_0^2} e^{-2k_c a} \quad (46)$$

Ainsi, nous en déduisons donc que la probabilité de trouver l'électron après la barrière n'est pas nulle, mais prend une forme exponentiellement décroissante et a donc le comportement d'une onde "évanescence" de portée $\frac{1}{k_c}$. Par suite, lorsque la largeur de la barrière a est très inférieure à cette portée, la particule a une probabilité importante de traverser la barrière par "effet tunnel", et inversement, on peut remarquer que comme expliqué précédemment, si la largeur de la barrière est importante, le coefficient de transmission va tendre vers 0 et il n'y aura donc plus d'effet tunnel.

3.2.2 L'effet tunnel avec WKB

Mais pour des barrières de potentiels carrées, le potentiel présente des discontinuités marquées, et l'approximation WKB ne peut donc pas marcher correctement pour ce genre de problèmes [3]. Cette approximation se révèle être particulièrement commode pour traiter un problème où le potentiel varie lentement sur une certaine distance. Lorsque la morphologie de la barrière est complexe (avec une dépendance en x), la résolution de l'équation de Schrödinger n'est plus triviale. En utilisant l'approximation WKB, le coefficient de transmission T d'une telle barrière devient donc :

$$T = \left| \frac{\Psi_{WKB}(x_2)}{\Psi_{WKB}(x_1)} \right|^2 \quad (47)$$

Où x_1 et x_2 correspondent aux points de rebroussement

En développant l'équation sur T , on obtient :

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx} \quad (48)$$

On retrouve donc une fois de plus une forme exponentielle décroissante pour la transparence T , comme nous l'avons vu dans l'exemple précédent.

3.3 Dédoublément des niveaux d'énergie dans les doubles puits symétriques

Le dédoublement d'énergie est un phénomène directement lié à l'effet tunnel. Si la barrière était infranchissable, alors la particule resterait dans un des deux puits et il existerait des niveaux d'énergies séparés et identiques dans chacun des deux puits. Puisque la particule a la possibilité de franchir la barrière, on ne peut plus considérer chaque puits comme un système isolé et cela aboutit au dédoublement des niveaux d'énergie et à la levée de la dégénérescence. [1] [4]

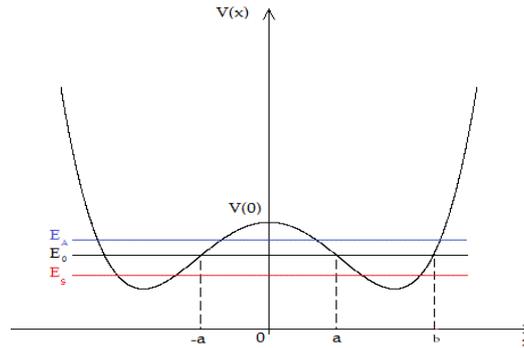


FIGURE 3.4 – Double puits de potentiel, a représente le point de rebroussement pour lequel $E = V$

Pour caractériser ce phénomène, on utilise la fonction d'onde établie dans la partie précédente pour construire les fonctions d'onde associées au système (à partir de la fonction d'onde d'un puits simple) :

$$\Psi_S(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(x) + \Psi(-x)], \Psi_A(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(x) - \Psi(-x)] \quad (49)$$

$\Psi_S(x)$ est la fonction d'onde symétrique

$\Psi_A(x)$ est la fonction d'onde antisymétrique

$$\Delta E = E_A - E_S = E_A - E_0 - (E_S - E_0) \quad (50)$$

Pour calculer $E_A - E_0$ et $E_S - E_0$, on procède de la manière suivante :

$$\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - V)\Psi = 0 \quad (51)$$

$$\Psi_S'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - V)\Psi_S = 0 \quad (52)$$

$$\Psi_A'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_A - V)\Psi_A = 0 \quad (53)$$

En multipliant l'équation (51) par Ψ_S , et la (52) par Ψ , et en soustrayant la première équation à la deuxième, on obtient finalement :

$$\Psi''\Psi_S - \Psi_S''\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - E_0)\Psi\Psi_S = 0 \quad (54)$$

On intègre maintenant l'équation sur x de 0 à ∞ , ce qui nous donne :

$$\int_0^\infty \Psi''\Psi_S dx - \int_0^\infty \Psi_S''\Psi dx + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - E_0) \int_0^\infty \Psi\Psi_S dx = 0 \quad (55)$$

On remarque :

$$\int_0^\infty \Psi \Psi_S dx \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (56)$$

Car $\Psi(x)\Psi(-x)$ est négligeable partout dans l'espace

Il vient que :

$$\Psi'(0)\Psi(0) - \frac{m}{\hbar^2}(E_0 - E_S) = 0 \quad (57)$$

On en déduit :

$$E_S - E_0 = \frac{-\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \quad (58)$$

En effectuant un raisonnement analogue, on trouve que :

$$E_A - E_0 = \frac{\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \quad (59)$$

Il vient finalement :

$$E_A - E_S = \frac{2\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \quad (60)$$

On injecte maintenant la méthode WKB dans ce que l'on vient de faire. On obtient :

$$\Psi_{WKB}(0) = \frac{c}{\sqrt{p(0)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a p dx} \quad (61)$$

On déduit l'expression de c , la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\int_0^\infty |\Psi_{WKB}(x)|^2 dx = 1 \quad (62)$$

On a donc :

$$c^2 \int_a^b \frac{1}{p} dx = 1 \quad (63)$$

On effectue le changement de variable : $x = \frac{pt}{m}$, il vient donc :

$$\frac{c^2}{m} \int_0^{\frac{T}{2}} dt = 1 \quad (64)$$

Avec T le temps mis par la particule pour faire un aller-retour dans le puits

Il vient alors :

$$\frac{c^2 T}{2m} = 1 \quad (65)$$

Donc :

$$c = \sqrt{\frac{2m}{T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} \quad (66)$$

En remarquant également que :

$$\Psi'_{WKB}(0) = \frac{p(0)}{\hbar} \Psi_{WKB}(0) \quad (67)$$

Finalement, on en déduit donc que :

$$E_A - E_S = \frac{\omega \hbar}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a p dx} \quad (68)$$

On peut constater que la différence d'énergie est fonction de deux paramètres : le terme de pulsation $\hbar\omega$, ainsi que la largeur de la barrière (terme dans l'exponentielle). Cette différence d'énergie sera donc d'autant plus grande si l'énergie est importante et si la barrière est mince.

Par suite, on peut en déduire une expression pour T. En partant de :

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (69)$$

On en déduit :

$$\int_0^{\frac{T}{2}} dt = \int_a^b \frac{dx}{v} \quad (70)$$

Et ainsi :

$$T = 2 \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{\frac{2(E-V(x))}{m}}} \quad (71)$$

Chapitre 4

Conclusion

L'approximation WKB est un outil simple et performant permettant l'étude de systèmes complexes et des prédictions analytiques en physique atomique, moléculaire, nanophysique ainsi que la description du rayonnement HAWKING dans les trous noirs.

Elle permet une explication simple du phénomène de la radioactivité α (cf. chap.III franchissement d'une barrière) ainsi que du phénomène d'inversion de la molécule d'ammoniac (cf. chap.III double puits harmonique) qui seront explicités en détail lors de la présentation et sur le site du projet.

Elle permet également de généraliser la notion de trajectoire pour une particule là où, en mécanique quantique "pure", cette notion est absente. Elle représente donc un pont entre la mécanique classique et la mécanique quantique.

Bibliographie

- [1] Lev Landau and Evguéni Lifchitz, *Physique théorique : mécanique quantique*, Tome 3, Editions MI MOSCOU, 1975.
- [2] Predrag Cvitanovic, *Chaos, classical and quantum*, Chapter 32 : WKB Quantization, December 2004.
- [3] Elie Belorizky, *Initiation à la mécanique quantique*, DUNOD, 2000.
- [4] Marko Robnik, Luca Salasnich and Marko Vranicar, *WKB corrections to the energy splitting in double well potentials*, Submitted to Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 7 June 1999.

Remerciements

Durant tout le long de notre projet, nous avons été soutenus et épaulés par notre tuteur Monsieur ALBERT Mathias, de par sa très grande implication dans notre travail, son aide ainsi que sa disponibilité qu'il a pu nous apporter depuis le début. C'est pourquoi nos plus sincères remerciements lui sont adressés. Il est important pour nous également de remercier le laboratoire qui nous a accueilli, l'*Institut Non Linéaire de Nice*, où nous avons pu nous rendre dès que nous le voulions. Enfin, il nous est essentiel de remercier Madame DOYA Valérie pour avoir répondu à nos questions et pour toutes les explications qu'elle nous a apportées et qui nous ont été utiles tout le long de notre projet.