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]

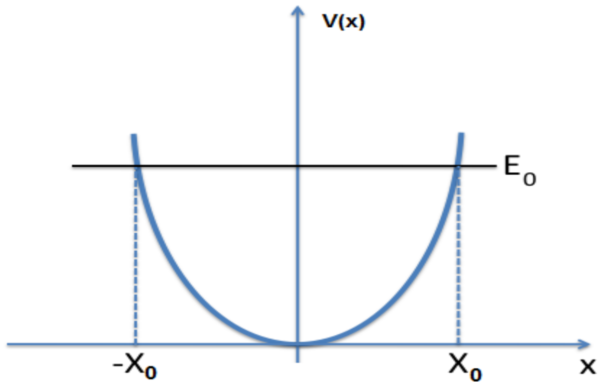

FIGURE 2.1 - Puits de potentiel harmonique

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

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

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

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

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 :

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

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

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 :

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

En utilisant la formule de l'intégrale de Fresnel :

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

On obtient finalement :

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

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

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

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

On identifie :

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

Puis :

$$\Phi(x) = \int_x^{x_0} pdx - px \tag{29}$$

On a :

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

$$\Phi''(x_0) = p'(x_0) \tag{31}$$

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

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

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.