



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.
CORSO DI LAUREA IN MATEMATICA

Sintesi della
Tesi di Laurea in Matematica

Metodo WKB: applicazione alla doppia buca di potenziale

Candidata
Elisa Giunta

Relatore
Dott.ssa Cecilia Tarantino

ANNO ACCADEMICO 2010-2011
FEBBRAIO 2012

Classificazione AMS: 70.0, 81.0, 81.41.

Parole chiave AMS: Meccanica quantistica, approssimazioni ed espansioni, sistemi di particelle.

Metodo WKB

Nella tesi abbiamo adottato un metodo approssimato per risolvere l'equazione di Schrödinger, detto metodo WKB, dalle iniziali dei nomi G. Wentzel, H. A. Kramers e L. Brillouin, i quali lo introdussero nel 1926 [1]-[3].

È importante osservare che tale metodo si può applicare con successo nel caso in cui il potenziale varia su scala maggiore della lunghezza d'onda [4]-[6]. La soluzione dell'equazione di Schrödinger per una particella di massa m soggetta ad un potenziale $V(x)$, risulta scritta in una forma semplice, simile a quella nota in modo esatto nel caso in cui $V(x) = c$, dove c è una costante. Ad esempio per una regione in cui l'energia E della particella è maggiore del potenziale, la soluzione ottenuta con il metodo WKB ha la forma:

$$\Psi(x) \simeq \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}, \quad (1)$$

dove C è una costante e $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$.

L'approssimazione WKB però non vale nei punti detti di inversione in cui $p(x) = 0$, cioè dove la particella classicamente si fermerebbe e tornerebbe indietro. Si procede allora determinando con il metodo WKB l'approssimazione della funzione d'onda nelle varie regioni delimitate dai punti di inversione per poi utilizzare una *tecnica di raccordo* per congiungere le funzioni d'onda così definite.

Esemplifichiamo l'applicazione del metodo WKB per risolvere l'equazione di Schrödinger nel caso di un singolo punto di inversione [5].

Consideriamo una particella in moto unidimensionale. Supponiamo che alla destra del punto $x = a$, ovvero per i valori di $x > a$, si trovi una regione classicamente proibita dove $E < V(x)$ (*regione II*), mentre alla sinistra di a , ovvero per i valori di $x < a$, il moto sia possibile classicamente dove $E > V(x)$ (*regione I*). Il punto $x = a$ è per definizione caratterizzato dalla relazione $V(a) = E$, dove $V(x)$ è l'energia potenziale ed E l'energia della particella. In tale punto la velocità della particella si annulla, ovvero $p(a) = 0$, si tratta cioè di un punto di inversione del moto.

In approssimazione WKB per un punto di inversione $x = a$, la soluzione dell'equazione di Schrödinger è data da:

$$\Psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^a |p(y)| dy} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(y) dy}, & \text{se } x < a; \\ \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(y)| dy}, & \text{se } x > a. \end{cases} \quad (2)$$

con $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ e m la massa della particella. Occorre raccordare la funzione $\Psi(x)$ nei due tratti $x < a$ e $x > a$, scegliendo opportunamente i coefficienti C_1 , C_2 e C . Tenendo conto che in $x = a$ l'approssimazione WKB non è lecita, confrontiamo le soluzioni ottenute con il metodo WKB, attorno al punto di inversione e allo stesso tempo valide per valori di x abbastanza lontani dal punto $x = a$, con la soluzione di una equazione di Schrödinger approssimata (nota come *funzione d'onda di raccordo* [6]), ottenuta sviluppando in serie l'energia potenziale attorno al punto di inversione.

Per individuare la funzione d'onda di raccordo (Ψ_r) nell'intorno del punto di inversione, approssimiamo il potenziale tramite l'espansione in serie

$$V(x) \underset{x \sim a}{\simeq} V(a) + V'(a)(x - a). \quad (3)$$

Inoltre un potenziale lineare implica una forza costante che si definisce

$$F_* = -\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=a}, \quad (4)$$

e nel caso in questione risulta essere negativa. Dalle relazioni (3) e (4) segue

$$E - V(x) \simeq F_*(x - a). \quad (5)$$

Risolviamo l'equazione di Schrödinger con questo potenziale linearizzato:

$$\Psi_r''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} F_*(x - a) \Psi_r(x) = 0. \quad (6)$$

Definiamo le seguenti variabili

$$z \equiv \left[-\frac{2m}{\hbar^2} F_* \right]^{\frac{1}{3}} (x - a), \quad \beta \equiv \left[-\frac{2m}{\hbar^2} F_* \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (7)$$

da cui si ottiene

$$z \equiv \beta (x - a). \quad (8)$$

In termini della variabile z , l'equazione (6) assume la forma

$$\frac{d^2 \Psi_r}{dz^2} = z \Psi_r, \quad (9)$$

le cui soluzioni sono chiamate **funzioni di Airy**. Dal momento che l'equazione di Airy è un'equazione differenziale di secondo ordine, ci sono due *funzioni di Airy* linearmente indipendenti, $Ai(z)$ e $Bi(z)$, le cui forme asintotiche sono: per grandi valori positivi di z ($z \gg 0$)

$$Ai(z) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}}}, \quad Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}}}, \quad (10)$$

e per grandi valori negativi di z ($z \ll 0$)

$$Ai(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{\frac{1}{4}}} \cos \left[\frac{2}{3} (-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right], \quad (11)$$

$$Bi(z) \sim -\frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{\frac{1}{4}}} \sin \left[\frac{2}{3} (-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (12)$$

Una combinazione di queste due funzioni indipendenti dà luogo alla soluzione generale dell'equazione di Airy:

$$\Psi_r(x) = k Ai[\beta(x - a)] + q Bi[\beta(x - a)], \quad (13)$$

con una scelta opportuna delle costanti k , q .

In questo modo è stata determinata la funzione d'onda Ψ_r approssimata attorno al punto di inversione $x = a$. Osserviamo che le regioni I e II sono

sufficientemente vicine al punto di inversione da garantire l'accuratezza del potenziale linearizzato e rendere Ψ_r una buona approssimazione alla funzione d'onda vera, ma allo stesso tempo così lontane da esso che l'approssimazione WKB risulta affidabile. Possiamo allora confrontare per le due regioni la funzione d'onda WKB con quella di raccordo.

Regione II : $E - V(\mathbf{x}) < 0, \mathbf{x} > \mathbf{a}$

In questa regione $p(x)$ risulta essere immaginaria e quindi $|p(x)|$ reale

$$|p(x)| \simeq \sqrt{2m[V(x) - E]} \simeq \sqrt{-2mF_*} \sqrt{x - a} = \hbar\beta^{\frac{3}{2}} \sqrt{x - a}. \quad (14)$$

La funzione d'onda WKB può essere scritta

$$\Psi(x) \simeq \frac{C}{2\sqrt{\hbar}\beta^{\frac{3}{4}}(x - a)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}[\beta(x-a)]^{\frac{3}{2}}}, \quad x > a. \quad (15)$$

Considerando $z = \beta(x - a) > 0$ e usando la forma asintotica delle funzioni di Airy per grandi valori positivi di z , la funzione d'onda approssimata diventa

$$\Psi_r(x) \simeq \frac{k}{2\sqrt{\pi}[\beta(x - a)]^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}[\beta(x-a)]^{\frac{3}{2}}} + \frac{q}{\sqrt{\pi}[\beta(x - a)]^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}[\beta(x-a)]^{\frac{3}{2}}}. \quad (16)$$

Confrontando la funzione d'onda di raccordo con la funzione d'onda WKB definita per i valori di $x > a$, si ottiene la forma esplicita di k e q

$$k = \sqrt{\frac{\pi}{\beta\hbar}} C \quad \text{e} \quad q = 0. \quad (17)$$

Regione I : $E - V(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} < \mathbf{a}$

In questa regione $p(x)$ risulta essere una funzione reale

$$p(x) \simeq \sqrt{2m[E - V(x)]} \simeq \sqrt{-2mF_*} \sqrt{a - x} = \hbar\beta^{\frac{3}{2}} \sqrt{a - x}. \quad (18)$$

La funzione d'onda WKB può essere scritta

$$\Psi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{\hbar}\beta^{\frac{3}{4}}(a - x)^{\frac{1}{4}}} \left[C_1 e^{-i\frac{2}{3}[\beta(a-x)]^{\frac{3}{2}}} + C_2 e^{i\frac{2}{3}[\beta(a-x)]^{\frac{3}{2}}} \right], \quad x < a. \quad (19)$$

Considerando $z = \beta(x - a) < 0$, usando la forma asintotica delle funzioni di Airy per grandi valori negativi di z e tenendo conto che $q = 0$ la funzione d'onda approssimata diventa

$$\Psi_r(x) \simeq \frac{k}{2\sqrt{\pi}[\beta(a-x)]^{\frac{1}{4}}} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{2}{3}[\beta(a-x)]^{\frac{3}{2}}} + e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{2}{3}[\beta(a-x)]^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (20)$$

Confrontando la funzione d'onda di raccordo con la funzione d'onda WKB definita per i valori di $x < a$, vediamo che sussistono le seguenti uguaglianze

$$\frac{k}{2\sqrt{\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} = \frac{C_1}{\sqrt{\hbar\beta}} \quad \text{e} \quad \frac{k}{2\sqrt{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} = \frac{C_2}{\sqrt{\hbar\beta}}, \quad (21)$$

in cui andiamo a sostituire il valore di k trovato nell'espressione (17), determinando così i coefficienti della funzione d'onda WKB:

$$C_1 = \frac{C}{2} e^{i\frac{\pi}{4}} \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{C}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}}. \quad (22)$$

Queste sono le cosiddette *formule di connessione*, che raccordano le soluzioni WKB a destra e a sinistra del punto di inversione.

Esprimendo la **funzione d'onda WKB** in termini della sola costante di normalizzazione C , si ottiene:

$$\Psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(y) dy - \frac{\pi}{4}\right), & \text{se } x < a; \\ \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(y)| dy}, & \text{se } x > a. \end{cases} \quad (23)$$

Con lo stesso procedimento si è risolta l'equazione di Schrödinger per due punti di inversione sia nel caso di uno *stato legato* che nel caso di uno *stato di diffusione* nel quale risulta interessante studiare il fenomeno dell'*effetto tunnel*. In particolare abbiamo considerato il processo di *decadimento* α , che può essere modellizzato come fenomeno di effetto tunnel e trattato con il metodo WKB. Le previsioni risultano in buon accordo con le osservazioni sperimentali.

Oscillatore armonico

Ogni potenziale vicino ad un minimo è approssimativamente parabolico.

Consideriamo per semplicità un sistema unidimensionale sottoposto ad un generico potenziale $V(x)$, dotato di minimo nel punto x_0 .

Il sistema, inizialmente in equilibrio in x_0 , viene perturbato debolmente in modo che si sposta poco dalla posizione di equilibrio. Il moto del sistema si determina sviluppando $V(x)$ in serie di Taylor intorno al punto di minimo x_0

$$V(x) \simeq \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2. \quad (24)$$

La relazione (24) descrive un *oscillatore armonico semplice* attorno al punto x_0 , con una costante elastica $k = V''(x_0)$ che risulta essere positiva essendo x_0 un punto di minimo.

È questo il motivo che rende l'oscillatore armonico semplice così importante: nell'intorno di un punto di minimo, qualunque tipo di moto oscillatorio è con una buona approssimazione armonico semplice e quindi ogni potenziale vicino a un minimo è ben approssimato da un potenziale armonico.

Presentiamo il risultato ottenuto applicando il metodo WKB al caso dell'oscillatore armonico la cui soluzione esatta dell'equazione di Schrödinger è nota ed è calcolata con il metodo operatoriale di Dirac.

In questo lavoro di tesi abbiamo trovato in modo approssimato, con il metodo WKB, gli autovalori e le autofunzioni relativi all'equazione di Schrödinger corrispondenti ad uno *stato legato*, di potenziale armonico pari

a $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, dove m è la massa della particella e ω la pulsazione.

Tenendo presente che i punti di inversione sono

$$-a = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad \text{e} \quad a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \quad (25)$$

è stato possibile delimitare il potenziale armonico in tre regioni: classicamente proibita (regione I, $x < -a$; regione III, $x > a$) e classicamente permessa (regione II, $-a < x < a$). Nella regione II risulta conveniente distinguere: la regione II_a, $-a < x \leq 0$ e la regione II_b, $0 < x < a$, dove la funzione d'onda WKB assume lo stesso valore.

Dalla condizione di quantizzazione

$$\frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar, \quad (26)$$

dove nel modello in esame

$$\frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{1}{\pi} \int_{-a}^a p(x) dx, \quad (27)$$

si trovano i livelli energetici dell'oscillatore armonico ottenuti con il metodo WKB

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (28)$$

che risultano coincidere con quelli esatti.

Le funzioni d'onda ottenute con il metodo WKB, al contrario dei livelli energetici, non sono riprodotte esattamente dall'approssimazione utilizzata. La simmetria del potenziale $V(x)$ nell'oscillatore armonico (ovvero $V(x) = V(-x)$) implica la presenza di funzioni d'onda WKB simmetriche ($n = 2k$, $k \in N$) e antisimmetriche ($n = 2k + 1$, $k \in N$).

Abbiamo trovato la **funzione d'onda WKB dell'oscillatore armonico**, valida nelle diverse regioni, nel **caso simmetrico** ($n = 2k, k \in \mathbf{N}$)

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{I}}(x) &\simeq \frac{D_2}{2\sqrt{m\omega\sqrt{x^2 - a^2}}} e^{\frac{m\omega}{\hbar} \left[\frac{x}{2} \sqrt{\frac{a+x}{x-a}} (a-x) + \frac{a^2}{2} \operatorname{arccosh}\left(-\frac{x}{a}\right) \right]} \\
\Psi_{\text{II}_a}(x) &\simeq \frac{D_2}{\sqrt{m\omega\sqrt{a^2 - x^2}}} \cdot \cos \left[\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{ax}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin\left(-\frac{x}{a}\right) + \frac{a^2\pi}{4} \right) - \frac{\pi}{4} \right] \\
\Psi_{\text{II}_b}(x) &\simeq \frac{D_2}{\sqrt{m\omega\sqrt{a^2 - x^2}}} \cdot \cos \left[\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{a^2\pi}{4} - \left(\frac{ax}{2}\right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \right) - \frac{\pi}{4} \right] \\
\Psi_{\text{III}}(x) &\simeq \frac{D_2}{2\sqrt{m\omega\sqrt{x^2 - a^2}}} e^{\frac{m\omega}{\hbar} \left[-\frac{x}{2} \sqrt{\frac{x-a}{a+x}} (a+x) + \frac{a^2}{2} \operatorname{arccosh}\left(\frac{x}{a}\right) \right]},
\end{aligned} \tag{29}$$

e nel **caso antisimmetrico** ($n = 2k + 1, k \in \mathbf{N}$)

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{I}}(x) &\simeq - \frac{D_2}{2\sqrt{m\omega\sqrt{x^2 - a^2}}} e^{\frac{m\omega}{\hbar} \left[\frac{x}{2} \sqrt{\frac{a+x}{x-a}} (a-x) + \frac{a^2}{2} \operatorname{arccosh}\left(-\frac{x}{a}\right) \right]}, \\
\Psi_{\text{II}_a}(x) &\simeq - \frac{D_2}{\sqrt{m\omega\sqrt{a^2 - x^2}}} \cdot \cos \left[\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{ax}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin\left(-\frac{x}{a}\right) + \frac{a^2\pi}{4} \right) - \frac{\pi}{4} \right], \\
\Psi_{\text{II}_b}(x) &\simeq \frac{D_2}{\sqrt{m\omega\sqrt{a^2 - x^2}}} \cdot \cos \left[\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{a^2\pi}{4} - \left(\frac{ax}{2}\right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \right) - \frac{\pi}{4} \right], \\
\Psi_{\text{III}}(x) &\simeq \frac{D_2}{2\sqrt{m\omega\sqrt{x^2 - a^2}}} e^{\frac{m\omega}{\hbar} \left[-\frac{x}{2} \sqrt{\frac{x-a}{a+x}} (a+x) + \frac{a^2}{2} \operatorname{arccosh}\left(\frac{x}{a}\right) \right]}.
\end{aligned} \tag{30}$$

Per determinare completamente la funzione d'onda WKB occorre fissare la costante D_2 , la quale si esplicita tramite la condizione di normalizzazione

della funzione d'onda WKB

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (31)$$

Per normalizzare la funzione d'onda è sufficiente integrare $|\Psi(x)|^2$ soltanto per i valori di x compresi nell'intervallo $[-a, a]$, poichè all'interno di esso otteniamo una buona approssimazione della funzione d'onda WKB, mentre fuori di esso la funzione $\Psi(x)$ si smorza esponenzialmente. Facendo ulteriori approssimazioni sulla funzione integranda possiamo determinare così la costante di normalizzazione in funzione della pulsazione ω

$$D_2 = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}. \quad (32)$$

Facendo uso del programma Mathematica abbiamo rappresentato graficamente la funzione d'onda WKB nel caso simmetrico per i valori di $n = 0, 2, 10, 20$ e nel caso antisimmetrico per i valori di $n = 1, 5, 15$, per la scelta dei parametri $m = \omega = \hbar = 1$. Inoltre al variare di n , abbiamo confrontato la funzione d'onda WKB con quella esatta come rappresentato in fig. (1) e (2). È evidente che il metodo WKB funziona bene al di fuori di un piccolo intorno dei punti di inversione e fornisce una buona approssimazione per la funzione d'onda esatta tanto maggiore è il valore di n .

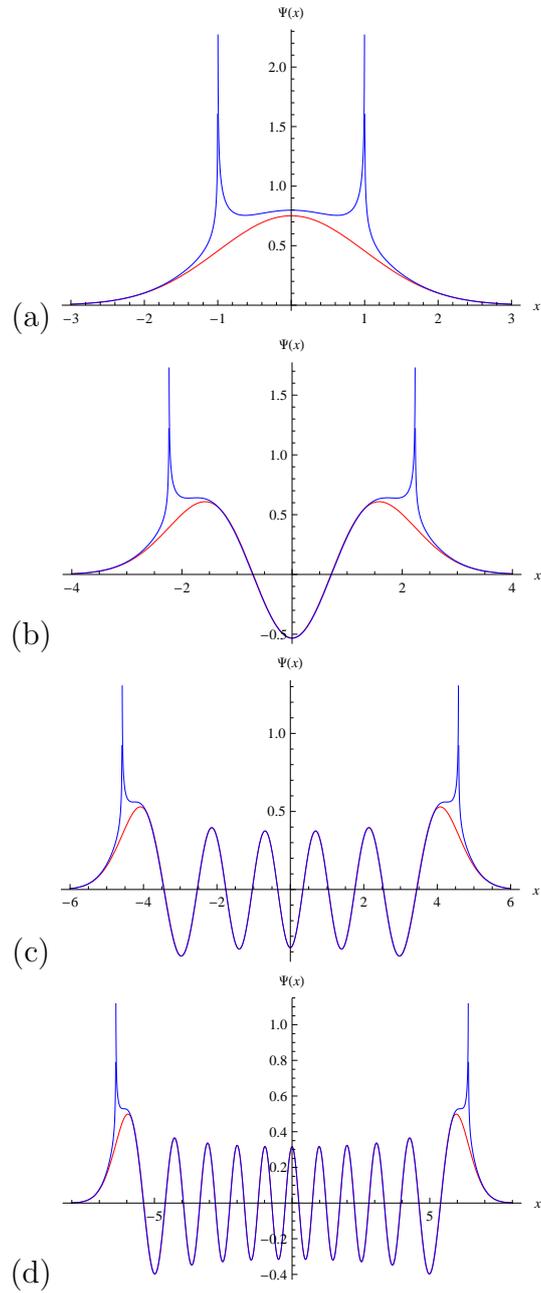


Figura 1: La funzione d'onda WKB (linea blu) e funzione d'onda esatta (linea rossa) in funzione di x , nel caso simmetrico, per gli stati: (a) $n=0$, (b) $n=2$, (c) $n=10$, (d) $n=20$.

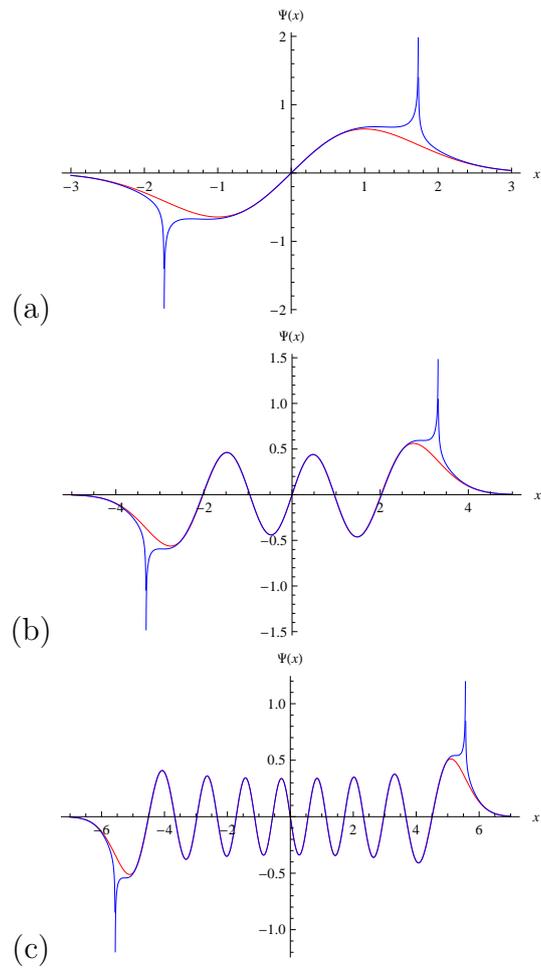


Figura 2: La funzione d'onda WKB (linea blu) e la funzione d'onda esatta (linea rossa) in funzione di x , nel caso antisimmetrico, per gli stati: (a) $n=1$, (b) $n=5$, (c) $n=15$.

Doppia buca di potenziale

L'importanza dello studio del potenziale di doppia buca risiede nel fenomeno di *rottura spontanea di simmetria*, fenomeno presente in meccanica classica, che non trova riscontro in meccanica quantistica per sistemi con un numero finito di gradi di libertà, quali i sistemi non relativistici, e che invece esiste in sistemi quantistici con infiniti gradi di libertà descritti da teorie dei campi. Il meccanismo di rottura spontanea di simmetria è di notevole importanza in fisica, in particolare in fisica delle particelle poichè può spiegare la massa delle particelle elementari che mediano l'interazione, ovvero i bosoni di gauge W e Z, e dei quark, grazie alla presenza del campo di Higgs. Il bosone di Higgs è una particella massiva, scalare; nell'ipotesi che esista, sarebbe l'unica particella del modello standard a non essere stata ancora osservata.

Il lavoro di tesi risulta di attualità, infatti citiamo a questo proposito gli esperimenti Atlas e CMS all'acceleratore LHC del Cern (Ginevra). Gli esperimenti Atlas e CMS hanno registrato un segnale che potrebbe essere dovuto alla presenza di un bosone di Higgs di massa circa 125 GeV. È necessario però aumentare la statistica per poter affermare o meno la scoperta dell'Higgs. Gli esperimenti Atlas e CMS prevedono di raggiungere la statistica sufficiente ad un'eventuale scoperta nel 2012.

Consideriamo ora più esplicitamente l'espressione del potenziale a doppia buca che si scrive $V(x) = \lambda x^4 - \mu^2 x^2 + \frac{\mu^4}{4\lambda}$ con $\lambda > 0$, $\mu^2 > 0$. Il potenziale considerato presenta due punti di minimo pari in $x_{min} = \pm \frac{\mu}{\sqrt{2\lambda}}$ e un massimo pari in $x_{max} = 0$.

Applicando il metodo WKB, al caso della doppia buca di potenziale, troviamo in modo approssimato autovalori ed autofunzioni dell'equazione di Schrödinger, la cui soluzione esatta contrariamente al caso dell'oscillatore armonico, non è nota. Per la simmetria del potenziale $V(x)$, le autofunzioni possono essere simmetriche o antisimmetriche.

Siano a e b i punti di inversione così definiti per i valori di $x \geq 0$

$$a = \sqrt{\frac{\mu^2}{2\lambda} - \sqrt{\frac{E}{\lambda}}} \quad \text{e} \quad b = \sqrt{\frac{\mu^2}{2\lambda} + \sqrt{\frac{E}{\lambda}}}, \quad (33)$$

dove i valori di energia E ai quali siamo interessati, sono definiti nell'intervallo $[0, \frac{\mu^4}{4\lambda})$, perchè inferiori al massimo relativo del potenziale e quindi soggetti all'effetto tunnel.

Tenendo presente i punti di inversione, trovati come soluzione dell'equazione $E = V(x)$, è stato possibile delimitare il potenziale considerato in tre regioni¹ dove la funzione d'onda WKB risulta essere applicabile: classicamente proibita (regione I, $0 \leq x < a$; regione III, $x > b$), classicamente permessa (regione II, $a < x < b$). Nella regione II risulta conveniente distinguere la regione II_a, $a < x \leq x_{min}$ e la regione II_b, $x_{min} < x < b$, dove la funzione d'onda WKB assume lo stesso valore.

Siano θ e Φ , costanti in x e funzioni dell'energia E , definite nel seguente modo

$$\theta = \frac{\sqrt{2m\lambda} b}{\hbar} \frac{1}{3} [(a^2 + b^2)E(\rho, q) - 2a^2 F(\rho, q)], \quad (34)$$

$$\Phi = \frac{2\sqrt{2m\lambda} b}{\hbar} \frac{1}{3} [(a^2 + b^2)E(\eta, t) - (b^2 - a^2)F(\eta, t)], \quad (35)$$

i cui integrali ellittici [7] dipendono dalle costanti ρ, q, η, t

$$\rho = \frac{\pi}{2}, \quad q = \frac{\sqrt{b^2 - a^2}}{b}, \quad \eta = \frac{\pi}{2}, \quad t = \frac{a}{b}. \quad (36)$$

Applicando il metodo WKB troviamo che θ e Φ sono legate dalla condizione di quantizzazione

$$\tan \theta = \pm 2e^{\Phi}. \quad (37)$$

¹Possiamo limitarci a considerare $x > 0$ data la simmetria del potenziale.

L'equazione (37) per m , \hbar , λ e μ fissati determina i livelli di energia approssimati, corrispondenti ad autofunzioni simmetriche o antisimmetriche a seconda del segno considerato. Dalla relazione (37) definita con il segno positivo si ricavano le energie permesse corrispondenti ad autofunzioni simmetriche, mentre con il segno negativo quelle corrispondenti ad autofunzioni antisimmetriche.

Scriviamo la funzione d'onda WKB valida per i valori di $\mathbf{x} \geq 0$

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{I}}(x) &\simeq \frac{R}{2\sqrt{2m\lambda}\sqrt{(a^2-x^2)(b^2-x^2)}} \cdot \left(\sin \theta e^{-\frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{b}{3} [(a^2+b^2)E(\gamma,t) - (b^2-a^2)F(\gamma,t)] - \frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{x}{3} (x^2-2b^2-a^2) \sqrt{\frac{a^2-x^2}{b^2-x^2}}} + \right. \\
&\quad \left. + 2 \cos \theta e^{\frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{b}{3} [(a^2+b^2)E(\gamma,t) - (b^2-a^2)F(\gamma,t)] + \frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{x}{3} (x^2-2b^2-a^2) \sqrt{\frac{a^2-x^2}{b^2-x^2}}} \right), \\
\Psi_{\text{II}_a}(x) &\simeq \frac{R}{\sqrt{2m\lambda}\sqrt{(x^2-a^2)(b^2-x^2)}} \cdot \left[\cos \left(\frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{b}{3} [(a^2+b^2)E(\delta,q) - 2a^2F(\delta,q)] + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \left(\frac{x^2-b^2-a^2}{3x} \right) \sqrt{(b^2-x^2)(x^2-a^2)} + \frac{\pi}{4} - \theta \right), \\
\Psi_{\text{II}_b}(x) &\simeq \frac{R}{\sqrt{2m\lambda}\sqrt{(x^2-a^2)(b^2-x^2)}} \cdot \left[\cos \left(\frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{b}{3} [(a^2+b^2)E(\beta,q) - 2a^2F(\beta,q)] + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{x}{3} \sqrt{(b^2-x^2)(x^2-a^2)} - \frac{\pi}{4} \right), \\
\Psi_{\text{III}}(x) &\simeq \frac{R}{2\sqrt{2m\lambda}\sqrt{(x^2-a^2)(x^2-b^2)}} \cdot \left(e^{-\frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{b}{3} [(a^2+b^2)E(\alpha,t) - (b^2-a^2)F(\alpha,t)] - \frac{\sqrt{2m\lambda}}{\hbar} \frac{x}{3} (x^2-b^2-2a^2) \sqrt{\frac{x^2-b^2}{x^2-a^2}}} \right),
\end{aligned} \tag{38}$$

i cui integrali ellittici dipendono dalle variabili α , β , δ , γ definiti per alcuni valori di x

$$\gamma = \arcsin \frac{b}{a} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{b^2 - x^2}}, \quad 0 \leq x < a; \quad (39)$$

$$\delta = \arcsin \frac{b}{x} \sqrt{\frac{x^2 - a^2}{b^2 - a^2}}, \quad a < x \leq b; \quad (40)$$

$$\beta = \arcsin \sqrt{\frac{b^2 - x^2}{b^2 - a^2}}, \quad a \leq x < b; \quad (41)$$

$$\alpha = \arcsin \sqrt{\frac{x^2 - b^2}{x^2 - a^2}}, \quad x > b. \quad (42)$$

Applicando la condizione di simmetria $\Psi(x) = \Psi(-x)$ e ricavando le energie permesse dalla relazione (37) definita con il segno positivo, troviamo la funzione d'onda WKB **simmetrica**, valida nelle diverse regioni. Applicando la condizione di antisimmetria $\Psi(x) = -\Psi(-x)$ e ricavando le energie permesse dalla relazione (37) definita con il segno negativo, troviamo la funzione d'onda WKB **antisimmetrica**, valida nelle diverse regioni.

La costante R , presente nella funzione d'onda WKB simmetrica e antisimmetrica, viene determinata dalla condizione di normalizzazione della funzione d'onda WKB

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 = 1, \quad (43)$$

ovvero la relazione (43) può essere scritta nel seguente modo

$$2 \left(\int_0^a |\Psi_{\text{I}}(x)|^2 dx + \int_a^b |\Psi_{\text{II}}(x)|^2 dx + \int_b^{+\infty} |\Psi_{\text{III}}(x)|^2 dx \right) = 1. \quad (44)$$

Gli integrali che hanno come estremi di integrazione un solo o entrambi i punti di inversione vengono calcolati escludendo i punti di inversione, cioè dove il metodo WKB fornisce una buona approssimazione per la funzione d'onda.

Per la scelta dei parametri $m = \frac{1}{2}$ e $\hbar = 1$, il nostro lavoro di tesi ha previsto un confronto tra i valori dei livelli di energia trovati con il metodo WKB e quelli riportati negli articoli [8] e [9], per alcuni casi di μ e λ presenti

Parametri			Tesi	Articolo [8]
μ	λ	n	ΔE_0^{WKB}	ΔE_0
2	1	0	0.50137	0.46242
2.8284	1	0	0.00144	0.00151

(a)

Parametri			Tesi			Articolo [9]		
μ	λ	n	E_n^{WKB} <i>sim.</i>	E_n^{WKB} <i>antisim.</i>	ΔE_n^{WKB}	E_n <i>sim.</i>	E_n <i>antisim.</i>	ΔE_n
1	0.05	0	1.3738	1.3754	0.0016	1.3584	1.3601	0.0017
		1	3.7800	3.8872	0.1072	3.7469	3.8488	0.1019
1	0.10	0	1.2779	1.3923	0.1144	1.2345	1.3469	0.1124

(b)

Figura 3: Nelle tabelle (a) e (b) si confrontano i valori ottenuti attraverso il metodo WKB con i risultati riportati in letteratura.

in letteratura. Definendo con l'indice n il livello di energia, le differenze dei livelli energetici tra gli stati simmetrici e antisimmetrici determinate con il metodo WKB, ΔE_n^{WKB} , risultano essere in accordo con quelle ottenute in letteratura ΔE_n come è possibile vedere nelle tabelle (a) e (b) di fig. (3).

Inoltre, facendo uso del programma Mathematica, per ogni livello di energia trovato è stata realizzata una rappresentazione grafica della funzione d'onda ottenuta con il metodo WKB, simmetrica e antisimmetrica, al variare di n come descritto nelle figg. (4), (5) e (6).

Infine, per confronto, abbiamo adottato anche il metodo descritto da L. D. Landau [10], in cui la doppia buca è rappresentata come sovrapposizione di due oscillatori armonici.

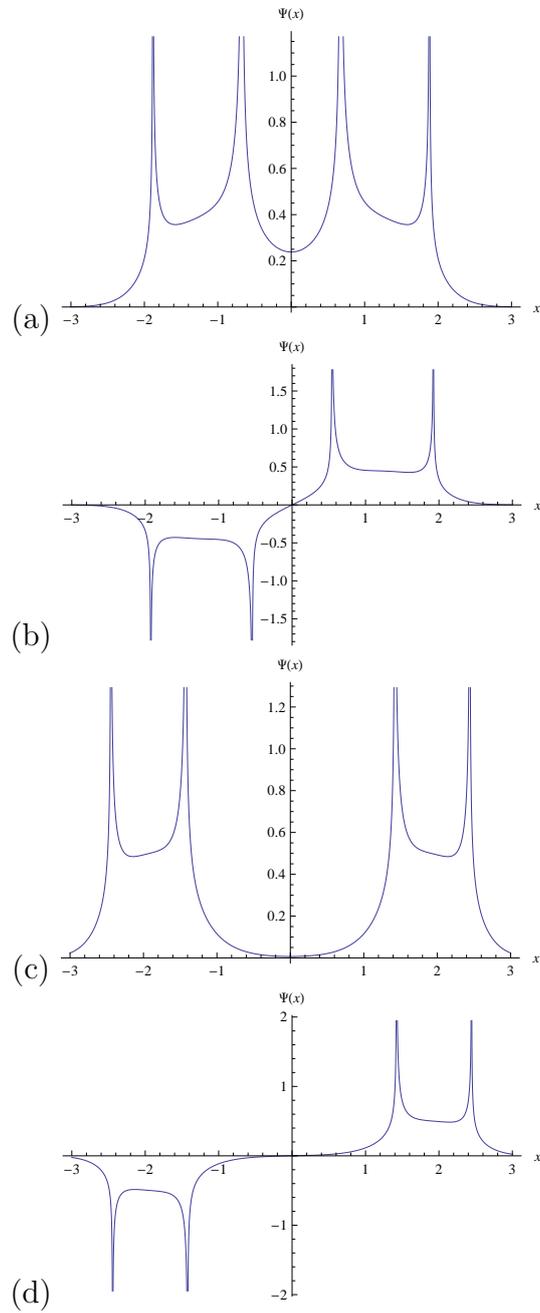


Figura 4: La funzione d'onda WKB in funzione di x definita per lo stato $n=0$, nel caso simmetrico (a), nel caso antisimmetrico (b) per $\mu = 2$ e $\lambda = 1$; nel caso simmetrico (c) e nel caso antisimmetrico (d) per $\mu = 2.8284$ e $\lambda = 1$.

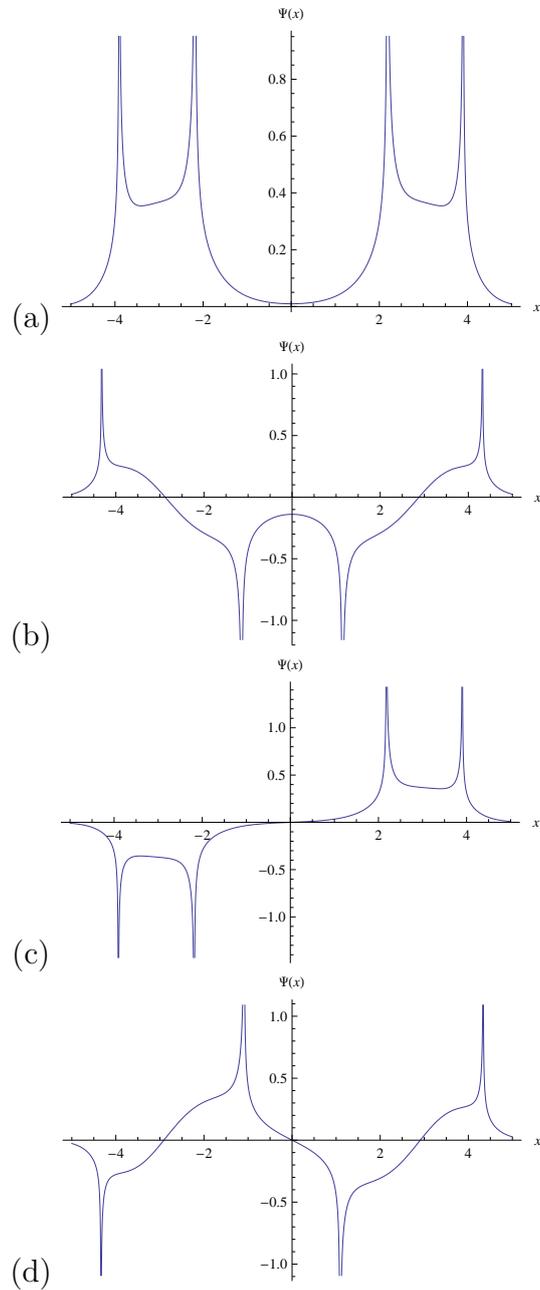


Figura 5: *La funzione d'onda WKB in funzione di x , per $\mu = 1$ e $\lambda = 0.05$, nel caso simmetrico definita per gli stati: (a) $n=0$, (b) $n=1$; nel caso antisimmetrico definita per gli stati: (c) $n=0$, (d) $n=1$.*

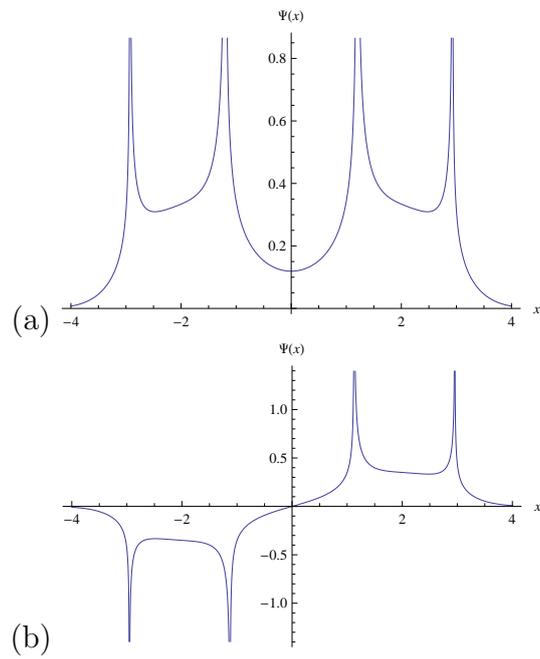


Figura 6: *La funzione d'onda WKB in funzione di x , per $\mu = 1$ e $\lambda = 0.10$, definita per lo stato $n=0$, nel caso simmetrico (a) e nel caso antisimmetrico (b).*

Bibliografia

- [1] G. Wentzel, *Zeits. f. Phys.*, 38, 518 (1926).
- [2] H. A. Kramers, *Zeits. f. Phys.*, 39, 828 (1926).
- [3] L. Brillouin, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 183, 24 (1926).
- [4] J. J. Sakurai, *Meccanica Quantistica Moderna*, Zanichelli Editore, 1990.
- [5] G. Nardulli, *Meccanica Quantistica II, Applicazioni*, F. Angeli, 2001.
- [6] D. J. Griffiths, *Introduzione alla Meccanica Quantistica*, Casa Editrice Ambrosiana, 2005.
- [7] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, 1965.
- [8] C. Presilla and U. Tambini, *A Selective relaxation method for numerical solution of Schrödinger problems*, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 4495.
- [9] K. Banerjee and S. P. Bhatnagar, *Two Well Oscillator*, *Phys. Rev. D* **18** (1978) 4767.
- [10] L. D. Landau, E. M. Lifšits, *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti, Edizioni Mir, 1976.