Note sulla Buca/Barriera di Potenziale
Introduzione alla Meccanica Quantistica A.A. 2004–2005
Prof. G. Martinelli

1 Soluzione dell'Equazione di Schrödinger

Sia data una particella di massa m che si muove in una dimensione in presenza di un potenziale definito dall'equazione

$$V(x) = U_0\,\Theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right) \qquad U_0 > 0\,, \tag{1}$$

come mostrato in figura 1.

Indichiamo le tre regioni ($x < -L/2\,; -L/2 \leq x \leq L/2\,; x > L/2$) come ($I\,; II\,; III$) rispettivamente e le corrispondenti soluzioni dell'equazione di Schrödinger,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= \mathcal{H}\,\psi(x,t)\,, \\ \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\,, \end{aligned} \tag{2}$$

come $\psi(x,t) \equiv (\psi_I(x,t)\,; \psi_{II}(x,t)\,; \psi_{III}(x,t))$.

Consideriamo ora le soluzioni stazionarie dell'eq. (2),

$$\begin{aligned} \psi_E(x,t) &= e^{-iEt/\hbar}\,\psi_E(x)\,, \\ \mathcal{H}\,\psi_E(x) &= E\,\psi_E(x)\,, \end{aligned} \tag{3}$$

corrispondenti ad un'autovalore $E < U_0$. Definiamo $\psi_E(x) \equiv (\psi_I(x)\,; \psi_{II}(x)\,; \psi_{III}(x))$, omettendo per semplicità di notazione il pedice E nella definizione di $\psi_{I,II,III}(x)$. Abbiamo dunque

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_{I,III}(x)}{dx^2} + k^2\psi_{I,III}(x) &= 0 \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,, \\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} - k'^2\psi_{II}(x) &= 0 \qquad k' = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}\,. \end{aligned} \tag{4}$$

La soluzione generale delle equazioni (4) è data da

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}\,, \\ \psi_{II}(x) &= C\, e^{-k'x} + D\, e^{+k'x}\,, \\ \psi_{III}(x) &= F\, e^{ikx} + G\, e^{-ikx}\,. \end{aligned} \tag{5}$$

Diverse scelte delle costanti complesse A, B, ..., G corrispondono a diverse situazioni dinamiche. Per esempio per un fascio entrante di particelle in moto da sinistra verso destra, corrispondente a $J_{in} = |A|^2 v$ dove la velocità classica è data da $v = k\hbar/m$, si deve scegliere $G = 0$. Per il momento non abbiamo bisogno di specificare alcuna scelta per le costanti in questione. Queste sono legate tra loro dalle condizioni al contorno per la funzione d'onda e per la sua derivata rispetto a x:

$$\begin{aligned} &\psi_I(x = -L/2) = \psi_{II}(x = -L/2) \qquad \frac{d\psi_I}{dx}(x = -L/2) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(x = -L/2) \qquad (I - II)\,, \\ &\psi_{II}(x = +L/2) = \psi_{III}(x = +L/2) \qquad \frac{d\psi_{II}}{dx}(x = +L/2) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(x = +L/2) \qquad (II - III)\,, \end{aligned} \tag{6}$$

ovvero

$$\begin{aligned} A\, e^{-ikL/2} + B\, e^{+ikL/2} &= C\, e^{+k'L/2} + D\, e^{-k'L/2} \\ ik\left(A\, e^{-ikL/2} - B\, e^{+ikL/2}\right) &= -k'\left(C\, e^{+k'L/2} - D\, e^{-k'L/2}\right) \qquad (I - II)\,, \end{aligned} \tag{7}$$

e similmente in $x = L/2$.

È particolarmente conveniente riscrivere le eq. (7) in forma vettoriale

$$\begin{pmatrix} e^{-ikL/2} & e^{+ikL/2} \\ e^{-ikL/2} & -e^{+ikL/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+k'L/2} & e^{-k'L/2} \\ i\frac{k'}{k} e^{+k'L/2} & -i\frac{k'}{k} e^{-k'L/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}\,, \tag{8}$$

e definire le matrici $H_1(L/2)$ e $H_2(L/2)$

$$H_1\left(\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = H_2\left(\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}\,. \tag{9}$$

Dall'equazione precedente ricaviamo

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = H_1^{-1}\left(\frac{L}{2}\right) H_2\left(\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = H\left(\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}\,, \tag{10}$$

con

$$H_1^{-1}\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{+ikL/2} & e^{+ikL/2} \\ e^{-ikL/2} & -e^{-ikL/2} \end{pmatrix} \tag{11}$$

e

$$\begin{aligned} H\left(\frac{L}{2}\right) &= H_1^{-1}\left(\frac{L}{2}\right) H_2\left(\frac{L}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{(+ik+k')L/2}\,(1+i\frac{k'}{k}) & e^{(+ik-k')L/2}\,(1-i\frac{k'}{k}) \\ e^{(-ik+k')L/2}\,(1-i\frac{k'}{k}) & e^{(-ik-k')L/2}\,(1+i\frac{k'}{k}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{12}$$

In $x = L/2$ le relazioni tra le costanti (C, D) e (F, G) si ottengono per simmetria $(x \leftrightarrow -x)$ da quelle in $x = -L/2$

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = H\left(-\frac{L}{2}\right)\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \tag{13}$$

ovvero

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = H^{-1}\left(-\frac{L}{2}\right)\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \tag{14}$$

con

$$H^{-1}\left(-\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{(+ik+k')L/2}\,(1-i\frac{k}{k'}) & e^{(-ik+k')L/2}\,(1+i\frac{k}{k'}) \\ e^{(+ik-k')L/2}\,(1+i\frac{k}{k'}) & e^{(-ik-k')L/2}\,(1-i\frac{k}{k'}) \end{pmatrix}. \tag{15}$$

La matrice di trasmissione delle onde dalla zona I alla III si ottiene sostituendo la relazione in eq. (14) nell'eq. (10)

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = H\left(\frac{L}{2}\right) H^{-1}\left(-\frac{L}{2}\right)\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \mathcal{T}(L)\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Nel caso di un fascio di particelle entrante da sinistra, ovvero ponendo $G = 0$, abbiamo

$$A = \mathcal{T}(L)_{11}F = T^{-1}(E, L)F \qquad \text{ovvero} \qquad F = T(E, L)A\,, \tag{17}$$

$$B = \mathcal{T}(L)_{21}F = S(E, L)F = S(E, L)T(E, L)A = R(E, L)A\,. \tag{18}$$

I coefficienti $T(E, L)$ e $R(E, L)$ sono i coefficienti di trasmissione e di riflessione di un'onda piana, ma possono essere utilizzati anche per propagare un pacchetto d'onde arbitrario come mostrate nelle pagine seguenti.

2 Barriere e buche di potenziale

Nel caso considerato fino ad ora, $E < U_0$, si ottiene

$$T(E,L) = \frac{e^{-ikL}}{\cosh(k'L) + \frac{1}{2i}\left(\frac{k^2-k'^2}{kk'}\right)\sinh(k'L)} \tag{19}$$

$$S(E,L) = \left(\frac{k^2+k'^2}{kk'}\right)\frac{\sinh(k'L)}{2i}\,. \tag{20}$$

Per quanto discusso nel seguito ci è utile dare anche l'espressione

$$P_T(E,L) = |T(E,L)|^2 = \frac{1}{1+\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k^2-k'^2}{kk'}\right)^2\right]\sinh^2(k'L)}\,; \tag{21}$$

$P_T(E,L)$ rappresenta la probabilità per una particella di traversare la barriera di potenziale.

Nel caso in cui l'energia sia maggiore dell'altezza della barriera, $E > U_0$, è sufficiente, per ottenere la soluzione, rimpiazzare k' con

$$k' \to iq' = i\sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \qquad \cosh(k'L) \to \cos(q'L) \qquad \sinh(k'L) \to i\sin(q'L)\,. \tag{22}$$

Per il coefficiente di trasmissione si ottiene in questo caso:

$$T(E,L) = \frac{e^{-ikL}}{\cos(q'L) + \frac{1}{2i}\left(\frac{k^2+q'^2}{kq'}\right)\sin(q'L)}\,. \tag{23}$$

L'espressione data in eq. (23) è valida anche nel caso della buca di potenziale, $V(x) = -U_0\,\Theta(L/2-|x|)$, utilizzando

$$q = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}\,, \tag{24}$$

invece di q'. Abbiamo inoltre

$$P_T(E,L) = |T(E,L)|^2 = \frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\frac{k^2-q^2}{kq}\right)^2\sin^2(qL)}\,. \tag{25}$$

3 Risonanze e soluzioni per la buca di potenziale finita

Studiamo ora l'andamento della probabilità di transizione $P_T(E, L)$ in eq. (25) in funzione del parametro adimensionale

$$\gamma = \frac{\hbar}{L}\sqrt{\frac{2}{mU_0}} \tag{26}$$

che rappresenta il rapporto tra l'energia cinetica, T, dei livelli più bassi in una buca di potenziale di larghezza L (come discusso nel seguito) e l'energia potenziale della buca, U,

$$E = T + U = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{q^2\hbar^2}{2m} - U_0\,. \tag{27}$$

Per valori di $\gamma << 1$ la probabilità di transizione presenta dei picchi molto pronunciati. L'altezza relativa dei picchi aumenta al diminuire di γ in modo tale che la probabilità di transizione è pressochè nulla tranne che nell'intorno di $qL \simeq n\pi$, con n intero ed è massima per questi valori dell'impulso. L'andamento di $P_T(E(k), L)$ in funzione del parametro k^2 (k^2 in fermi^{-2}) è mostrato in figura 2.

L'energia della particella, per valori di $q \simeq n\pi/L$ è con ottima approssimazione quella di una particella in una buca di potenziale estremamente profonda, al limite infinita,

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 - U_0\,. \tag{28}$$

Per mostrare quanto affermato cerchiamo gli autovalori, corrispondenti a energie negative $-U_0 < E < 0$, e le autofunzioni dell'equazione di Schrödinger in presenza del seguente potenziale

$$\begin{aligned} V(x) &= -U_0\,\Theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right) \qquad U_0 > 0\,, \\ V(x) &= 0 \qquad x \leq -\frac{L}{2} \quad \text{e} \quad x \geq +\frac{L}{2}\,. \end{aligned} \tag{29}$$

In questo caso, si ricordi che l'energia è negativa, si ottiene:

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= C_I\, e^{\kappa x} \qquad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad x < -\frac{L}{2} \\ \phi_{II}(x) &= C_{II}\, \sin(qx + \delta) \qquad q = \sqrt{\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}} \qquad -\frac{L}{2} \leq x \leq +\frac{L}{2} \\ \phi_{III}(x) &= C_{III}\, e^{-\kappa x} \qquad x > +\frac{L}{2}\,. \end{aligned} \tag{30}$$

Una volta trovata la soluzione dell'equazione di Schrödinger, dobbiamo imporre le condizioni al contorno in $x = -L/2$

$$\begin{aligned} C_I\, e^{-\kappa L/2} &= C_{II}\, \sin(-qL/2 + \delta)\,, \\ \kappa\, C_I\, e^{-\kappa L/2} &= q\, C_{II}\, \cos(-qL/2 + \delta)\,, \end{aligned} \tag{31}$$

e similmente per $-L/2 \to +L/2$.

Dall'equazione precedente otteniamo

$$[\tan(\delta - qL/2)]^{-1} = \frac{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}}\,, \tag{32}$$

ed inoltre, in $x = +L/2$,

$$[\tan(\delta + qL/2)]^{-1} = -\frac{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}}\,. \tag{33}$$

L'equazione (32) ha come soluzione

$$\begin{aligned} \cos(\delta - qL/2) = \sqrt{-\frac{E}{U_0}}\,, &\qquad \sin(\delta - qL/2) = \sqrt{1 + \frac{E}{U_0}} \\ &\longrightarrow \delta - qL/2 = \pm n\pi + \arcsin\left(\sqrt{\frac{(E+U_0)}{U_0}}\right)\,, \end{aligned} \tag{34}$$

mentre dall'eq. (33) otteniamo

$$\begin{aligned} \cos(\delta + qL/2) = \sqrt{-\frac{E}{U_0}}\,, &\qquad \sin(\delta + qL/2) = -\sqrt{1 + \frac{E}{U_0}} \\ &\longrightarrow \delta + qL/2 = \pm m\pi - \arcsin\left(\sqrt{\frac{(E+U_0)}{U_0}}\right)\,. \end{aligned} \tag{35}$$

Combinando le due equazioni qui sopra, e tenendo conto delle relazioni

$$E = \frac{q^2\hbar^2}{2m} - U_0 \quad \leftrightarrow \quad \frac{E+U_0}{U_0} = \frac{q^2\hbar^2}{2mU_0}\,, \tag{36}$$

otteniamo infine

$$qL = n\pi - 2\arcsin\left(\frac{q\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right)\,. \tag{37}$$

L'equazione (37) puo' essere piu' convenientemente scritta come

$$\gamma\xi = \sin\left(\frac{n\pi}{2} - \xi\right) , \tag{38}$$

dove $\xi = qL/2$ e γ è stato definito in eq. (26). A seconda che n sia pari o dispari, il che corrisponderebbe nel limite di buca infinitamente profonda alle soluzioni dispari($\phi(x) = -\phi(-x)$, $\phi_{II}(x) = \sin[(2l)\pi\, x/L]$) o pari ($\phi(x) = \phi(-x)$, $\phi_{II}(x) = \cos[(2l+1)\pi\, x/L]$) si ottiene

$$\begin{aligned} \gamma\xi &= \pm\sin(\xi) \ , \\ \gamma\xi &= \pm\cos(\xi) \ . \end{aligned} \tag{39}$$

La soluzione grafica di queste equazioni, al variare di γ è mostrata in figura 3.

Per $\gamma \to \infty$, ovvero per una buca di profondità e/o larghezza che tendono a zero, solo la seconda delle equazioni (39) ha una soluzione corrispondente a valori infinitesimi di ξ ($\gamma\xi$ deve essere minore di 1 perchè ci sia una soluzione). Espandendo la seconda delle (39) per valori infinitesimi di ξ si ottiene

$$\xi \simeq \frac{1}{\gamma}\left(1 - \frac{1}{2\gamma^2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\gamma^4}\right) . \tag{40}$$

Il limite $\gamma \to 0$ corrisponde al caso di buca infinitamente profonda. Questo è il caso che ci interessa per studiare i picchi (o risonanze) della probabilità di transizione in eq. (25). Per trovare le soluzioni dobbiamo espandere i termini che appaiono nell'equazione (38) per valori infinitesimi dell'argomento del seno, $n\pi/2 - \xi$

$$\begin{aligned} \xi = \frac{n\pi}{2} - \gamma\xi &\simeq \frac{n\pi}{2} - \frac{\gamma n\pi}{2} + \mathcal{O}\left(\gamma^2\right) \\ &\to q \simeq \frac{n\pi}{L}(1-\gamma) + \mathcal{O}\left(\gamma^2\right) . \end{aligned} \tag{41}$$

$q = n\pi/L$ è nient'altro che la soluzione della buca infinitamente profonda; il secondo termine è la correzione di ordine più basso dovuta alla finitezza della buca. Per i livelli più bassi è possibile trascurare le correzioni di $\mathcal{O}(\gamma^2)$ o superiore. Per i livelli tali che $\gamma n\pi = \mathcal{O}(1)$ (corrispondente ai livelli eccitati della buca) la soluzione approssimata non è più adeguata e bisogna risolvere esattamente l'equazione trascendente (38).

4 Risonanze e Breit-Wigner

Consideriamo nuovamente l'ampiezza di transizione per la buca di potenziale di larghezza L e profondità U_0

$$T(E,L)e^{+ikL} = \frac{1}{\cos(qL) + \frac{1}{2i}\left(\frac{k^2+q^2}{kq}\right)\sin(qL)} \,. \tag{42}$$

Espandiamo l'espressione qui sopra per valori di $qL \simeq n\pi$, ovvero per valori prossimi a quelli corrispondenti agli stati legati stazionari della medesima Hamiltoniana. Utilizzando le seguenti approssimazioni

$$\begin{aligned} \cos(qL) &= (-1)^n + \mathcal{O}\left((qL-n\pi)^2\right) \\ \sin(qL) &= (-1)^n\,(qL-n\pi) + \mathcal{O}\left((qL-n\pi)^3\right)\,, \end{aligned} \tag{43}$$

possiamo scrivere

$$\begin{aligned} T(E,L)e^{+ikL} &= \frac{(-1)^n}{1+\frac{1}{2i}\left(\frac{k^2+q^2}{kq}\right)(qL-n\pi)} \\ &\simeq \frac{(-1)^n}{1+\frac{1}{2i}\left(\frac{k^2+q^2}{kq}\right)\frac{(qL)^2-(n\pi)^2}{2n\pi}} \\ &= \frac{(-1)^n}{1+\frac{1}{2i}\left(\frac{k^2+q^2}{kq}\right)\left(\frac{mL^2}{n\pi\hbar^2}\right)\left(\frac{(q\hbar)^2}{2m}-\frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2}\right)}\,, \end{aligned} \tag{44}$$

dove abbiamo utilizzato $(qL+n\pi)/2n\pi \simeq 1$. Chiamiamo l'energia della particella e l'energia dello stato risonante

$$E = \frac{(q\hbar)^2}{2m} - U_0\,, \qquad E^* = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2} - U_0\,, \tag{45}$$

rispettivamente e introduciamo la "larghezza" della risonanza definita come

$$\frac{\Gamma}{2} = \left[\frac{1}{2}\left(\frac{k^2+q^2}{kq}\right)\left(\frac{mL^2}{n\pi\hbar^2}\right)\right]^{-1}\,. \tag{46}$$

In termini di queste quantità, possiamo dunque scrivere l'espressione approssimata dell'ampiezza di transizione vicino alla risonanza, eq. (44), come

$$T(E,L)e^{+ikL} = \frac{(-1)^n}{1+\frac{2}{i\Gamma}(E-E^*)} = \frac{(-1)^n i\Gamma/2}{E-E^*+\frac{i\Gamma}{2}}\,. \tag{47}$$

Questa espressione è chiamata funzione di Breit-Wigner o anche Lorenziana.

Siamo ora pronti a discutere il significato fisico delle risonanze e il comportamento dell'ampiezza di transizione (e della corrispondente probabilità) vicino alle risonanze. A questo scopo riscriviamo l'ampiezza in termini del modulo e della fase

$$\begin{aligned} T(E,L)e^{+ikL} &= |T(E,L)e^{+ikL}|e^{i\varphi(E)} \\ T(E,L) &= |T(E,L)e^{+ikL}|e^{+i(\varphi(E)-kL)}\,, \\ \tan\varphi(E) &= \frac{2(E-E^*)}{\Gamma}\,. \end{aligned} \tag{48}$$

Si noti che la fase $\varphi(E)$ si annulla in corrispondenza alla risonanza, $E = E^*$ ovvero $q = n\pi/L$. Abbiamo inoltre

$$P_T(E,L)|_{qL\simeq n\pi} = |T(E,L)|^2 = |T(E,L)e^{+ikL}|^2 = \frac{\Gamma^2}{4}\frac{1}{(E-E^*)^2+\Gamma^2/4}\,. \tag{49}$$

In figura 4 viene presentato il modulo quadro della Breit-Wigner (47) in funzione dell'energia (in unità di misura arbitrarie). Dato che l'ampiezza di transizione è trascurabile fuori dalle regioni delle risonanze, la probabilità di transizione può essere approssimata come somma del contributo dovuto alle ampiezze risonanti, corrispondenti ai valori $q \simeq n\pi/L$.

Data la linearità dell'equazione di Schrödinger, se abbiamo un'onda entrante sovrapposizione di due onde piane (la dipendenza dal tempo è stata reintrodotta)

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= A(p_1)e^{i(p_1x-E_1t)/\hbar} + A(p_2)e^{i(p_2x-E_2t)/\hbar}\,, \qquad x < -\frac{L}{2} \\ E_1 &= \frac{p_1^2}{2m} \qquad E_2 = \frac{p_2^2}{2m}\,, \end{aligned} \tag{50}$$

allora l'onda trasmessa avrà la forma

$$\psi(x,t) = T(E_1,L)\,A(p_1)e^{i(p_1x-E_1t)/\hbar} + T(E_2,L)\,A(p_2)e^{i(p_2x-E_2t)/\hbar}\,, \qquad x > +\frac{L}{2}\,. \tag{51}$$

Consideriamo ora un pacchetto d'onda che rappresenti una particella localizzata che si muove da sinistra verso destra (ad esempio un pacchetto gaussiano che si muove con velocità media $v = \tilde{p}/m$)

$$\psi_I(x,t) = \int_0^{+\infty}\frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\,A(p)e^{i(px-E(p)t)/\hbar}\,, \qquad E(p) = \frac{p^2}{2m} \qquad x < -\frac{L}{2}\,. \tag{52}$$

Allora avremo

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x,t) &= \int_0^{+\infty}\frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\,T\left(E\left(p\right)\right)\,A(p)e^{i(px-E(p)t)/\hbar}\,, \qquad x > +\frac{L}{2}\,, \\ &= \int_0^{+\infty}\frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\,|T\left(E\left(p\right)\right)|\,A(p)e^{i(px-pL+\hbar\varphi(E)-E(p)t)/\hbar}\,, \qquad x > +\frac{L}{2}\,. \end{aligned} \tag{53}$$

La posizione del centro di massa del pacchetto d'onda si ricava calcolando la derivata della fase che appare nell'esponente dell'integrando calcolata per il valore di p per cui la distribuzione $A(p)$ ha un massimo pronunciato (approssimazione della fase stazionaria), nel nostro caso $p = \tilde{p}$ (metodo del punto di sella)

$$\frac{d}{dp}\left[px - pL + \hbar\varphi(E) - E(p)t\right]_{p=\tilde{p}=mv} = 0\,. \tag{54}$$

Tenendo conto della definizione di $\varphi(E)$ in eq. (48), e nell'approssimazione di Breit-Wigner, otteniamo

$$x = vt + L - v\left[\frac{2\hbar/\Gamma}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}\left(E(\tilde{p}) - E^*\right)^2}\right] \qquad x > +\frac{L}{2}\,. \tag{55}$$

Per ricavare la (55) abbiamo utilizzato la seguente catena di relazioni ottenuta a partire dall'ultima delle (48):

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dE}\tan\varphi(E) = (1 + \tan^2\varphi)\frac{d\varphi(E)}{dE} = \frac{2}{\Gamma} \qquad \text{ovvero} \\ &\frac{d\varphi(E)}{dp} = v\frac{d\varphi(E)}{dE} = \left[\frac{2/\Gamma}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}\left(E(p) - E^*\right)^2}\right]\,. \end{aligned} \tag{56}$$

Si noti che usando l'approssimazione della fase stazionaria per $x < -L/2$ troveremmo che il pacchetto si muove proprio con velocità v ($x = vt$), come mostrato in figura 5. La larghezza della distribuzione aumenta, come per tutti i pacchetti d'onda, al passare del tempo.

Nella zona oltre la barriera la posizione del pacchetto d'onda è quella in eq. (55). Il primo termine è il risultato classico per una particella che si muova con velocità v; il secondo corrisponde all'attraversamento della buca nel limite in qui questa sia infinitamente profonda e quindi il tempo Δt necessario per passare attraverso la buca tenda a zero; l'ultimo termine è il termine corrispondente al tempo che la particella rimane intrappolata nella buca. Per $E(\tilde{p}) = E^*$, ovvero in condizioni di risonanza, questo tempo è semplicemente $2\hbar/\Gamma = 2\tau$. τ puo' essere infatti interpretato come la "vita media" o tempo di decadimento dello stato legato formato dalla particella incidente quando è intrappolata nella buca profonda. Se fossimo partiti con la funzione d'onda corrispondente alla soluzione stazionaria della buca infinita, i.e.

$$\phi_{II}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \qquad \phi_{I,III}(x) = 0\,, \tag{57}$$

allora τ sarebbe il tempo caratteristico in cui $\phi_{II}(x)$ si diffonde fuori dalla buca, non essendo autofunzione dell'Hamiltoniana nel caso della buca finita che stiamo considerando.

A ulteriore dimostrazione di quanto affermato consideriamo la trasformata di Fourier temporale di una ampiezza che si comporti come una Breit-Wigner

$$\mathcal{A}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \frac{i\Gamma/2}{E - E^* + \frac{i\Gamma}{2}} e^{-iEt/\hbar}, \qquad t > 0. \tag{58}$$

Chiudendo il cammino di integrazione nel semipiano $Im(E) < 0$ otteniamo

$$\mathcal{A}(t) = \frac{\Gamma}{2} e^{-(iE^* + \Gamma/2)t/\hbar}. \tag{59}$$

Questo significa che la probabilità di trovare la particella al passare del tempo va come

$$P(t) = |\mathcal{A}(t)|^2 \propto e^{-\Gamma t/\hbar} = e^{-t/\tau} \tag{60}$$

ovvero diminuisce esponenzialmente al passare del tempo: la particella dunque "decade" in un tempo caratteristico che è dato da τ. Questo è in accordo col principio di indeterminazione di Heisenberg:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar. \tag{61}$$

Infatti se l'ampiezza è una Breit-Wigner, la distribuzione di energia ha un'indeterminazione dell'ordine di $\Gamma \sim \hbar/\tau$, e la particella decade precisamente in un tempo di ordine $\tau = \Delta t$, che è l'intervallo di tempo in cui abbiamo localizzato la particella. Ne segue che le particelle stabili (l'elettrone, il protone ??) hanno energia perfettamente definita ($\tau \to \infty$), visto che sono autostati del'Hamiltoniana (le particelle instabili non sono autostati dell'Hamiltoniana).