Evolución temporal de un paquete de ondas.

Ahora estamos en disposición de abordar el problema de la evolución temporal de un paquete de ondas. Vamos a suponer que en el instante inicial conocemos la función de onda, de modo que $\psi(\vec{r},0) = \phi(\vec{r})$. Lo que pretendemos es obtener la función de onda en el instante t, $\psi(\vec{r},t)$.

Sabemos que la solución más general de la ecuación de Schrödinger se puede expresar como una superposición de todos los estados estacionarios. Vamos a suponer, en primer lugar, que el espectro de energías es discreto. En este caso la solución más general vimos que era de la forma:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n f_n \, \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

donde $\varphi_n(\vec{r})$ es la autofunción del hamiltoniano con autovalor E_n normalizada.

Lo que tenemos que hacer es calcular cuánto deben valer los coeficientes f_n para que la función de onda en el instante inicial $t=0$ sea $\phi(\vec{r})$.

La función de onda en el instante inicial vale:

$$\phi(\vec{r}) = \psi(\vec{r},0) = \sum_n f_n \, \varphi_n(\vec{r}) = \sum_m f_m \, \varphi_m(\vec{r})$$

donde hemos podido cambiar el índice del sumatorio de n a m al tratarse de un índice mudo.

Si multplicamos esta ecuación por $\varphi_n^*(\vec{r})$ e integramos en todo el espacio queda:

$$\int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) = \sum_m f_m \int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \varphi_m(\vec{r})$$

Ahora bien, según hemos visto en la sección anterior la integral de la derecha vale $\delta_{n,mn}$ y:

$$\int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) = \sum_m f_m \, \delta_{n,m} = f_n$$

Por tanto, obtenemos el siguiente resultado:

$$f_n = \int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r},0)$$

Esta expresión nos permite obtener los coeficientes f_n del desarrollo. La función de onda en el instante t la podemos obtener a partir de la función de onda en el instante inicial mediante la siguiente ecuación:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n \left(\int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) \right) \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_n \left(\int d^3\vec{r} \; \varphi_n^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r},0) \right) \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Si nos fijamos, esto es muy similar a lo que hacíamos en el caso de una partícula libre. En ese caso, para obtener la función de onda en el instante t teníamos que calcular la transformada de Fourier de la función de onda en el instante inicial (de hecho, veremos más adelante que las autofunciones del Hamiltoniano de una partícula libre son precisamente las ondas armónicas planas).

El resultado anterior se generaliza fácilmente al caso en que el espectro de energías sea continuo. En este caso, la solución general de la ecuación de Schrödinger era:

$$\psi(\vec{r},t) = \int dE \;\, f(E)\, \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

donde $\varphi_E(\vec{r})$ son las autofunciones del hamiltoniano con autovalor E y normalizadas "en el sentido de Dirac". Vamos a ver cómo podemos calcular en este caso la función $f(E)$. Hacemos lo mismo que antes: escribimos la expresión anterior para $t = 0$:

$$\psi(\vec{r},0) = \phi(\vec{r}) = \int dE \;\, f(E)\, \varphi_E(\vec{r}) = \int dE' \;\, f(E')\, \varphi_{E'}(\vec{r})$$

Si multplicamos esta ecuación por $\varphi_E^*(\vec{r})$ e integramos en todo el espacio queda:

$$\int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \phi(\vec{r}) = \int dE' \;\, f(E') \int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \varphi_{E'}(\vec{r})$$

Para el caso de espectro continuo, si las funciones $\varphi_E(\vec{r})$ están normalizadas en el "sentido de Dirac" se verificaba que:

$$\int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \varphi_{E'}(\vec{r}) = \delta(E - E')$$

Por tanto:

$$\int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \phi(\vec{r}) = \int dE' \;\, f(E')\; \delta(E - E') = f(E)$$

es decir, que:

$$f(E) = \int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \phi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r},0)$$

Finalmente:

$$\psi(\vec{r},t) = \int dE \left(\int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \phi(\vec{r}) \right) \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \int dE \left(\int d^3\vec{r}\; \varphi_E^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r},0) \right) \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Podemos comparar con el caso de una partícula libre que se mueve en una sola dimensión. Recordemos que la función de onda en el instante t se puede escribir como:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0)\, e^{i(kx-\omega t)} \; dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0)\, e^{ikx} e^{-i\hbar k^2 t/2m} \; dk$$

donde $\tilde{\psi}(k,0)$ era la transformada de Fourier de la función de onda en el instante inicial:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x,0) \; dx$$

Podemos introducir esta expresión en la de $\psi(x,t)$ y queda:

$$\psi\left(x,t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\psi\left(x,0\right)\ dx\right)e^{ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\ dk$$

donde $E=\hbar^2k^2/2m$.

Vamos a comparar con la expresión que hemos obtenido anteriormente:

$$\psi(\vec{r},t)=\int dE\left(\int d^3\vec{r}\ \varphi_E^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r},0)\right)\varphi_E(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Vemos que las expresiones con muy similares, si consideramos que las autofunciones del operador hamiltoniano para la partícula libre son las funciones:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

Efectivamente, podemos comprobar que si aplicamos el hamiltoniano de la partícula libre a esta función nos queda una constante por la misma función:

$$\hat{H}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\right)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}=E\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\right)$$

Como conclusión final, para poder resolver un problema de condiciones iniciales en mecánica cuántica, lo primero que tenemos que hacer es encontrar las autofunciones del hamiltoniano, es decir, resolver la siguiente ecuación:

$$\hat{H}\varphi(\vec{r})=E\varphi(\vec{r})$$

Como hemos visto, esta ecuación es en realidad la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y es por lo que esta ecuación es casi tan importante como la propia ecuación de Schrödinger.