# 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:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_E f_E \, \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Lo que tenemos que hacer es calcular cuánto deben valer los coeficientes $f_E$ para que la función de onda en el instante inicial sea $\phi(\vec{r})$. Si conocemos los coeficientes $f_E$ la función de onda en el instante $t$ vendrá dada por la expresión anterior.

La función de onda en el instante inicial vale:

$$\phi(\vec{r}) = \psi(\vec{r},0) = \sum_E f_E \, \varphi_E(\vec{r})$$

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

$$\int d^3\vec{r} \; \varphi^*_{E'}(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) = \sum_E f_E \int d^3\vec{r} \; \varphi^*_{E'}(\vec{r}) \, \varphi_E(\vec{r})$$

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

$$\int d^3\vec{r} \; \varphi^*_{E'}(\vec{r}) \, \phi(\vec{r}) = \sum_E f_E \, \delta_{E,E'} = f_{E'}$$

Por tanto obtenemos el siguiente resultado:

$$f_E = \int d^3\vec{r} \; \varphi^*_E(\vec{r}) \, \phi(\vec{r})$$

Esta expresión nos permite obtener los coeficientes $f_E$ 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:

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

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 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. El resultado que se obtiene en este caso es el siguiente:

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

Por tanto, para poder resolver un problema de condiciones iniciales en mecánica cuántica, lo primero que tenemos que hacer es encontrar las funciones $\varphi_E(\vec{r})$, es decir, tenemos que resolver el problema de autovalores del Hamiltoniano:

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