Evolución temporal de un estado no estacionario.

Hasta ahora hemos estudiado los estados estacionarios de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico simple. Estos estados etacionarios no tienen ninguna analogía en la mecánica clásica, ya que aunque la partícula está sometida a una fuerza, la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula no varía con el tiempo. Vamos a ver qué ocurre cuando la partícula se encuentra en un estado no estacionario. Lógicamente en este caso la densidad de probabilidad variará con el tiempo. Como veremos, el movimiento de la partícula en este caso es muy similar a lo que ocurre en mecánica clásica.

En el apartado anterior hemos visto que para un estado estacionario tanto el valor medio de la posición como del momento son nulos en cualquier instante. Sin embargo si la partícula no se encuentra en un estado estacionario el valor medio de la posición y del momento variarán con el tiempo. Vamos a ver la evolución temporal de estas dos magnitudes. En un tema anterior vimos que el valor medio de un operador evoluciona en el tiempo de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{dA}{dt}\right\rangle$$

Vamos a utilizar esta ecuación para obtener la evolución del valor medio de la posición y del momento de una partícula en el oscilador armónico. Para ello necesitamos los conmutadores de los operadores de posición y momento con el hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{x},\hat{H}\right] &= \left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{x},\hat{p}^2\right] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p} \\
\left[\hat{p},\hat{H}\right] &= \left[\hat{p},\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right] = \frac{1}{2}m\omega^2\left[\hat{p},\hat{x}^2\right] = -i\hbar m\omega^2\hat{x}
\end{aligned}$$

Utilizando estas dos ecuaciones obtenemos que los valores medios de la posción y del momento evolucionan de acuerdo con las ecuaciones:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \\
\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle &= -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle
\end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones son idénticas a las ecuaciones de Hamilton para la evolución temporal de la posición y del momento de una partícula en el oscilador armónico, de modo que conocemos directamente su solución:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle(t) &= \langle\hat{x}\rangle(0)\cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\langle\hat{p}\rangle(0)\sin\omega t \\
\langle\hat{p}\rangle(t) &= \langle\hat{p}\rangle(0)\cos\omega t - m\omega\langle\hat{x}\rangle(0)\sin\omega t
\end{aligned}$$

Por tanto, para el oscilador armónico los valores medios de la posición y del momento de un paquete de ondas evolucionan exactamente igual que en mecánica clásica. Para ilustrar este fenómeno vamos a analizar la evolución temporal de un paquete de ondas concreto.

Vamos a suponer que en el instante inicial la partícula está descrita mediante un paquete de ondas gaussiano de la forma.

$$\psi(y,0) = Ae^{-(y-y_0)^2/2}$$

donde hemos usado la variable adimensional y. Para obtener la evolución temporal del paquete de ondas tenemos que escribirlo como una combinación lineal de los estados estacionarios:

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

Los estados estacionarios hemos visto que son de la forma:

$$\varphi_n(x) = a_n H_n(x) e^{-y^2/2}$$

donde las constantes a_n son las constantes de normalización $a_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$.

Para calcular los coeficientes c_n del desarrollo vamos a utilizar la función generadora de los polinomios de hermite, que recordamos que era

$$e^{2yz-z^2} = \sum_n \frac{H_n(y)}{n!} z^n$$

(utilizamos z en lugar de t para no confundirlo con el tiempo). Si utilizamos la notación $y_0 = 2z$ podemos escribir el estado inicial de la siguiente forma:

$$\psi(y,0) = Ae^{-(y-2z)^2/2} = Ae^{-y^2/2-s^2} e^{2yz-z^2}$$

de modo que podemos introducir los polinomios de Hermite de una forma muy simple mediante la función generadora

$$\psi(y,0) = Ae^{-y^2/2-s^2} \sum_{n=0} \frac{H_n(y)}{n!} z^n = Ae^{-z^2} \sum_{n=0} \frac{z^n}{a_n n!} a_n H_n(y) e^{-y^2/2}$$

Por tanto, hemos expresado el paquete de ondas en el instante inicial en función de los estados estacionarios ya que:

$$\psi(y,0) = Ae^{-y_0^2/4} \sum_{n=0} \frac{y_0^n}{2^n a_n n!} \varphi_n(y)$$

y los coeficientes del desarrollo son los números:

$$c_n = Ae^{-y_0^2/4} \frac{y_0^n}{2^n a_n n!}$$

Podemos obtener ya la función de onda en el instante t. Lo único que tenemos que hacer es multiplicar cada estado estacionario $\varphi_n(y)$ por el factor de fase $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$:

$$\begin{aligned} \psi(y,t) &= Ae^{-y_0^2/4} \sum_{n=0} \frac{y_0^n}{2^n a_n n!} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \varphi_n(y) \\ &= Ae^{-y_0^2/4} \sum_{n=0} \frac{y_0^n}{2^n a_n n!} e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t} \varphi_n(y) \end{aligned}$$

ahora deshacemos todos los cambios que hemos hecho para obtener el paquete de ondas no como un desarrollo sino de forma analítica:

$$\psi(y,t) = Ae^{-i\omega t/2} e^{-z^2} \sum_{n=0} \frac{\left(ze^{-i\omega t}\right)^n}{n!} H_n(y) e^{-y^2/2}$$

Si dentro del sumatorio utilizamos una nueva variable $z' = ze^{-i\omega t}$ queda:

$$\begin{aligned}\psi(y,t) &= Ae^{-i\omega t/2} e^{-z^2} \sum_{n=0} \frac{z'^n}{n!} H_n(y) = Ae^{-i\omega t/2} e^{-z^2} e^{-y^2/2} e^{2yz' - z'^2} = \\ &= Ae^{-i\omega t/2} \exp\left(-\frac{y_0^2}{4} - \frac{y^2}{2} + yy_0 e^{-i\omega t} - \frac{y_0^2}{4} e^{-2i\omega t}\right) =\end{aligned}$$

Por último vamos a separar la parte real de la imaginaria dentro de la exponencial y realizar algunas transformaciones trigonométricas:

$$\begin{aligned}&= Ae^{-i\omega t/2} \exp\left(-\frac{y^2}{2} + yy_0 \cos\omega t - \frac{y_0^2}{4}\left(1 + \cos 2\omega t\right)\right) \exp\left(-iyy_0 \sin\omega t + i\frac{y_0^2}{4} \sin 2\omega t\right) \\ &= Ae^{-i\omega t/2} \exp\left(-\frac{y^2}{2} + yy_0 \cos\omega t - \frac{y_0^2}{2} \cos^2\omega t\right) \exp\left(-iyy_0 \sin\omega t + i\frac{y_0^2}{4} \sin 2\omega t\right) \\ &= Ae^{-i\omega t/2} \exp\left(-\frac{\left(y - y_0 \cos\omega t\right)^2}{2}\right) \exp\left(-iyy_0 \sin\omega t + i\frac{y_0^2}{4} \sin 2\omega t\right)\end{aligned}$$

Por último, la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en el instante t viene dada por:

$$\rho(y,t) = \left|\psi(y,t)\right|^2 = \left|A\right|^2 e^{-(y - y_0 \cos\omega t)^2}$$

Es decir, que la densidad de probabilidad es una función de distribución gaussiana que oscila sin deformarse con una frecuencia ω. Por tanto, el movimiento del paquete de ondas es idéntico al de la partícula en mecánica clásica. El hecho de que el paquete de ondas no se deforme durante la evolución es algo particular del paquete de ondas gaussiano, de modo que para un paquete de ondas genérico no podemos esperar el mismo resultado. En la siguiente figura se muestra la evolución temporal del paquete de ondas gaussiano en el oscilador armónico.