La ecuación de Schrödinger para una partícula libre.

En este apartado, vamos a introducir la ecuación de onda para una partícula libre, es decir, una partícula que no está sometida a ningún tipo de fuerza. Hemos visto que en mecánica cuántica, una partícula viene descrita mediante una función de onda y lo que pretendemos es encontrar la ecuación diferencial en derivadas parciales que debe satisfacer esta función de onda. Vamos a comenzar con el caso más sencillo de una partícula libre que se mueve en una sola dimensión y posteriormente generalizaremos la ecuación para una partícula que se mueve en el espacio ordinario de tres dimensiones. Tenemos una ventaja y es que conocemos la solución más general para este caso, ya que la hemos analizado en los apartados anteriores, y que consiste en una superposición lineal de todas las ondas armónicas:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

donde $g(k)$ era el peso que le damos a cada onda armónica, que viene caracterizada por un valor del número de ondas, k, ya que la frecuencia angular está relacionada con k mediante la relación de dispersión $\omega = \hbar k^2/2m$.

La ecuación de onda debe ser una consecuencia de la relación de dispersión, ya que esta relaciona el número de ondas, que está asociado con la evolución espacial de la función de onda, con la frecuencia angular, que está asociada con la evolución temporal de la función de onda. Vamos a partir de una onda armónica $\varphi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$. Lo que vamos a hacer es encontrar una ecuación diferencial lineal, de modo que la función anterior sea una solución de dicha ecuación diferencial y que k y ω no aparezcan en la ecuación, pero estén relacionados mediante la relación de dispersión. De esta forma, la solución más general de la ecuación que encontremos será una superposición lineal de ondas armónicas. Viendo la forma de la función que hemos escogido, se deducen fácilmente las siguientes dos igualdades:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[Ae^{i(kx-\omega t)}\right] = \hbar\omega Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega\varphi(x,t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[Ae^{i(kx-\omega t)}\right] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi(x,t) \end{aligned}$$

Los términos que aparecen a la derecha son proporcionales a los que aparecen en la relación de dispersión, por tanto, si queremos que se verifique la relación de dispersión, los términos de la izquierda deben ser iguales. Es decir, que nuestra onda armónica satisface la siguiente ecuación lineal en derivadas parciales:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t)$$

Esta ecuación, además de ser lineal, no depende ni de k ni de ω de modo que cualquier onda armónica es solución de la ecuación. Además, por el hecho de ser lineal, cualquier superposición lineal de ondas armónicas también será solución de la ecuación. Por tanto, esta es la ecuación que estábamos buscando y que se conoce como la ecuación de Schrödinger para una partícula libre que se mueve en una sola dimensión:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

La solución general de esta ecuación viene dada por la primera ecuación del apartado: una superposición lineal de todas las ondas armónicas.

Podemos ver varias peculiaridades en esta ecuación diferencial. En los apartados anteriores, se han utilizado funciones de onda complejas, pero no nos importaba ya que cuando queríamos calcular una probabilidad o un valor medio multiplicábamos la función de onda por su complejo conjugado para evitar resultados complejos que no pueden tener significado físico. Esto es similar a lo que ocurre en electromagnetismo cuando se utilizan los fasores. Sin embargo, en la ecuación que hemos encontrado, aparece la unidad imaginaria, de modo que parece que nunca nos podremos librar del hecho de que la función de onda sea compleja (el electromagnetismo siempre se puede formular de modo que no aparezcan funciones complejas). Si queremos, podemos hacer que no aparezcan funciones complejas del siguiente modo. En lugar de la función de onda compleja, $\psi(x,t)$, podemos utilizar dos funciones reales $U(x,t)$ y $V(x,t)$, de modo que $\psi(x,t) = U(x,t) + iV(x,t)$. Podemos ver las ecuaciones en derivadas parciales que satisfacen las funciones $U(x,t)$ y $V(x,t)$. Las introducimos en la ecuación de Schrödinger anterior:

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\left[U(x,t)+iV(x,t)\right]}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\left[U(x,t)+iV(x,t)\right]}{\partial x^2} \\
\underbrace{i\hbar\frac{\partial U(x,t)}{\partial t}}\underline{-\hbar\frac{\partial V(x,t)}{\partial t}} &= \underline{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2}}\underbrace{-i\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial x^2}}
\end{aligned}
$$

Si queremos que se verifique la igualdad, la parte real del término de la izquierda debe ser igual a la parte real del término de la derecha y lo mismo con la parte imaginaria. Igualando parte imaginaria con parte imaginaria y parte real con parte real llegamos a las siguientes dos ecuaciones:

$$
\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial x^2} \qquad\qquad \frac{\partial V(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2}
$$

Vemos que ha desaparecido la unidad imaginaria. El sacrificio que hemos tenido que hacer es que habría que trabajar con dos funciones de onda. Además las dos son imprescindibles ya que las ecuaciones de onda anteriores están acopladas y, además, las dos intervienen para calcular la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición x en el instante t, que vale:

$$
\rho\left(x,t\right) = \left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 = U^2\left(x,t\right) + V^2\left(x,t\right)
$$

El sacrificio que hay que hacer para que desaparezca la i de la ecuación de onda es demasiado grande y es por lo que en mecánica cuántica siempre trabajaremos con funciones de onda complejas, ya que es más sencillo trabajar con una sola función de onda compleja que con dos reales.

Lo curioso es que en electromagnetismo también podríamos trabajar con un sólo campo electromagnético complejo que incluyera tanto el campo eléctrico como el magnético. Podemos definir el siguiente campo electromagnético complejo:

$$
\vec{\mathcal{E}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2}}\vec{E} + i\sqrt{\frac{\mu_0}{2}}\vec{H}
$$

La parte real contiene la información sobre el campo eléctrico y la parte imaginaria sobre la intensidad del campo magnético. Se puede ver fácilmente que las cuatro ecuaciones de Maxwell para el vacío (equivalente a nuestra partícula libre) se pueden escribir de la siguiente forma:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{\mathcal{E}}=0 \qquad\qquad \vec{\nabla}\times\vec{\mathcal{E}}=\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\mathcal{E}}$$

Es decir, que las cuatro ecuaciones de Maxwell se reducen a dos!

Podríamos extender el tratamiento para el caso en que existan fuentes de carga y densidad de corriente eléctrica. Las ecuaciones de Maxwell se escribirían en este caso como:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{\mathcal{E}}=\frac{\rho}{\sqrt{2\varepsilon_0}} \qquad\qquad \vec{\nabla}\times\vec{\mathcal{E}}=\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\mathcal{E}}+\frac{i}{c}\frac{\vec{j}}{\sqrt{2\varepsilon_0}}$$

En cualquier caso, podemos ver que en las ecuaciones anteriores aparece siempre la unidad imaginaria, i, al igual que ocurre en la ecuación de Schrödinger para la partícula libre. Es más, podemos llevar la analogía un poco más lejos. La densidad de energía del campo electromagnético vale:

$$\mathcal{U}_{\mathrm{em}}=\frac{\varepsilon_0}{2}\left|\vec{E}\right|^2+\frac{\mu_0}{2}\left|\vec{H}\right|^2$$

Si utilizamos el campo electromagnético complejo nos quedaría:

$$\mathcal{U}_{\mathrm{em}}=\vec{\mathcal{E}}^*\cdot\vec{\mathcal{E}}$$

y esta densidad de energía la podríamos interpretar como una densidad de probabilidad de encontrar un fotón en un determinado punto del espacio en el instante t!

En electromagnetismo no es costumbre trabajar con un campo eletromagnético complejo. La única ventaja sería ahorrarnos algo a la hora de escribir las ecuaciones. Pero la dificultad a la hora de resolverlas sería idéntica y la interpretación: parte real campo eléctrico y parte imaginaria magnético, sería mucho más complicada.

Por último, podemos generalizar fácilmente la ecuación de Schrödinger para la partícula libre al caso del movimiento de la partícula en el espacio ordinario de tres dimensiones. En este caso, la función de onda depende de las tres coordenadas espaciales y del tiempo, $\psi(\vec{r},t)$. Recordamos que la relación de dispersión para tres dimensiones es:

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2k_x^2}{2m}+\frac{\hbar^2k_y^2}{2m}+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$$

De modo que siguiendo el mismo razonamiento se llega a la siguiente ecuación en derivadas parciales:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(\vec{r},t)}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(\vec{r},t)}{\partial y^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(\vec{r},t)}{\partial z^2}$$

o bien

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger para una partícula libre que se mueve en el espacio ordinario.