

## Estados estacionarios. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

En este apartado vamos a aplicar el método de separación de variables a la ecuación de Schrödinger para obtener otra ecuación casi tan importante como la ecuación de Schrödinger como es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Vamos a suponer una solución particular para la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma:

$$\psi(\vec{r}, t) = T(t)\varphi(\vec{r})$$

Introduciendo esta solución en la ecuación de Schrödinger queda:

$$i\hbar\varphi(\vec{r})\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\nabla^2\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})T(t)\varphi(\vec{r})$$

donde hemos supuesto que el potencial no depende del tiempo. Podemos reordenar la ecuación anterior de la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} + V(\vec{r})$$

Vemos que el término de la izquierda depende única y exclusivamente del tiempo mientras que el término de la derecha depende exclusivamente de las coordenadas espaciales, por tanto, si se verifica la igualdad para cualquier instante  $t$  y en cualquier punto del espacio  $\vec{r}$ , los dos términos de la igualdad deben ser igual a una constante que notaremos por  $E$ . De modo que nos quedan las siguientes dos ecuaciones:

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{dT(t)}{dt} &= ET(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) &= E\varphi(\vec{r})\end{aligned}$$

La ecuación para la función temporal se resuelve fácilmente y queda:

$$T(t) = T_0e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

donde  $T_0$  es una constante de integración que se puede incluir en la función  $\varphi(\vec{r})$ . Por tanto, la solución particular que estamos analizando será de la forma:

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

donde la función  $\varphi(\vec{r})$  satisface la siguiente ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

La solución que estamos analizando se dice que es una solución estacionaria y la ecuación anterior se denomina la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Es fácil ver

por qué se llama la solución estacionaria y se debe a que la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula no depende del tiempo, ya que

$$\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = \varphi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r})$$

Si la solución estacionaria está normalizada, se verificará que  $\int \varphi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r}) d^3\vec{r} = 1$

Podemos ver que la función  $\varphi(\vec{r})$  es una autofunción del operador Hamiltoniano de autovalor  $E$ , es decir, que se verifica que  $\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$ . Al igual que el operador  $\hat{p}$  es el operador momento, de modo que su valor medio sobre la función de onda nos da el valor medio del momento, el operador  $\hat{H}$  está relacionado con la energía de la partícula y el valor medio del operador  $\hat{H}$  nos dará el valor medio de la energía. Pues bien, para el caso de una solución estacionaria el valor medio del Hamiltoniano es igual a  $E$ .

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int \psi^*(\vec{r}, t)\hat{H}\psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \int \varphi^*(\vec{r})e^{\frac{i}{\hbar}Et}\hat{H}\varphi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} d^3\vec{r} = \\ &= \int \varphi^*(\vec{r})E\varphi(\vec{r}) d^3\vec{r} = E \end{aligned}$$

Además, la solución estacionaria tiene una energía bien definida (sin dispersión). Según podemos ver, para una solución estacionaria, la función de onda oscila con una frecuencia  $\omega = E/\hbar$ , que es la frecuencia asociada a una partícula de acuerdo con la hipótesis de de Broglie. Para poder encontrar todas las posibles soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger hay que resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para todos los posibles valores de  $E$ . Según veremos, es posible que  $E$  no pueda tomar cualquier valor, dependiendo de las condiciones de contorno que haya que imponer a la función de onda. El conjunto de todos los posibles valores de  $E$  se denomina el espectro de energías (o bien, el espectro de valores propios o autovalores del Hamiltoniano). Este espectro puede ser continuo o discreto, o bien parte del espectro puede ser continuo y parte discreto. Para un valor particular de  $E$  podemos notar por  $\varphi_E(\vec{r})$  a la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La solución general de la ecuación de Schrödinger será una superposición lineal de todos los de estados estacionarios (esto es una consecuencia directa del principio de superposición lineal, ya que la suma de dos posibles funciones de onda será también una posible función de onda). Si el espectro de energías es discreto la solución más general será de la forma:

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

donde  $f_E$  son los coeficientes del desarrollo para cada valor de  $E$ . Podemos comprobar que esta función es efectivamente una solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) &= i\hbar\sum_E f(E)\varphi_E(\vec{r})\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \sum_E f(E)E\varphi_E(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \hat{H}\psi(\vec{r}, t) &= \sum_E f(E)\hat{H}\varphi_E(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \sum_E f(E)E\varphi_E(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{aligned}$$

por lo tanto, la función anterior verifica la ecuación de Schrödinger. Por otro lado, en el caso en que el espectro sea continuo, la solución más general será de la forma

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

donde  $f(E)$  es una función arbitraria de  $E$ . Normalmente el problema que nos interesa no es conocer cuál es la solución arbitraria de la ecuación de Schrödinger sino poder calcular la evolución temporal de la función de onda si conocemos la función de onda en el instante inicial. Esto es similar a lo que hacemos en mecánica clásica. Si conocemos las condiciones iniciales nos interesa conocer la evolución temporal de la partícula. Vamos a ver cómo podemos resolver este problema en mecánica cuántica. Lo primero que vamos a hacer en el siguiente apartado es analizar algunas propiedades importantes del operador Hamiltoniano que nos servirán para resolver este problema.