A. Apéndices

A.1 Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

En este apartado, veremos como se resuelve la ecuación de Schrödinger para potenciales que no dependen del tiempo, es decir, $V(r,t) = V(r)$. Si además para simplificar los cálculos, utilizamos solo una dimensión espacial, tenemos:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) \tag{A.1}$$

Si además asumimos que la solución es del tipo $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$, podemos aplicar separación de variables para resolver la ecuación, tenemos:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)\phi(t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)\phi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) \tag{A.2}$$

Aplicando propiedades de derivación:

$$i\hbar\psi(x)\frac{\partial}{\partial t}\phi(t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) \tag{A.3}$$

Dividimos en ambas partes por $\psi(x)\phi(t)$:

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d}{dt}\phi(t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \tag{A.4}$$

De esta manera, tenemos una parte de la ecuación que depende solo de la parte temporal y otra que solo depende de la parte espacial. Como se trata de ecuaciones diferenciales la única solución es que ambas partes de la ecuación sean igual a una constante. Es decir:

$$\frac{1}{\psi(x)}[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)] = E$$

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d}{dt}\phi(t) = E \tag{A.5}$$

Hemos llamado E a la constante porque tiene dimensiones de energía. Vamos a empezar con la parte temporal:

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d}{dt}\phi(t) = E$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\phi(t) = E\phi(t)$$

$$\frac{d}{dt}\phi(t) = \frac{-iE\phi(t)}{\hbar}$$

$$\phi(t) = Ke^{\frac{-i}{\hbar}Et} \tag{A.6}$$

En el ultimo paso hemos resuelto una ecuación diferencial ordinaria y por eso nos aparece la constante integración K.

Ahora vamos con la parte espacial:

$$\frac{1}{\psi(x)}[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)] = E$$

$$[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)]\psi(x) = E\psi(x) \tag{A.7}$$

En este punto es necesaria hacer una definición más, el operador hamiltoniano H, que representa la energía del sistema:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{A.8}$$

Sustituyendo este operador en la ecuación A.7, tenemos:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{A.9}$$

Como H es un operador (matriz hermítica en un espacio de Hilbert) y E es un escalar, deducimos que A.9 es una ecuación de autovalores. Y se conoce como ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.