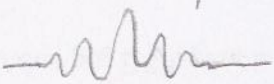
Ecuación de Schrödinger

✓ Si tenemos una partícula libre que se mueve a lo largo del eje x, hemos visto que la función de onda que representa a esa partícula debe tener una forma como  (pulso) y que el pulso puede escribirse como una sumatoria

$$\Psi_{(x,t)} = \sum_{k} A_k \cos(kx - \omega t) \qquad (1)$$

(Ver documento "Velocidad de fase y de grupo", pag. Web)

✓ Es importante recordar que la energía total de una partícula libre es

$$E = K + U \qquad (2)$$

donde K es su energía cinética y U es constante pues la fuerza sobre la partícula es igual a cero por ser libre.

✓ Ya que $\cos(kx - \omega t) = Re\left(e^{i(kx - \omega t)}\right)$ (3),

la ecuación (1) puede escribirse como

$$\Psi_{(x,t)} = Re\left(\sum_{k} A_k e^{i(kx - \omega t)}\right) \qquad (4)$$

$$\Psi_{(x,t)} = Re\left(\sum_{k} \Psi_k\right) \qquad (5)$$

con A_k real.

Cada componente de la sumatoria anterior es

$$\Psi_k = A_k \, e^{i(kx-\omega t)} \qquad (6)$$

Vamos a calcular varias derivadas parciales:

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial x} = i k A_k \, e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial x^2} = -k^2 A_k \, e^{i(kx-\omega t)} = -k^2 \Psi_k \qquad (6)$$

y

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = -i\omega A_k \, e^{i(kx-\omega t)} = -i\omega \Psi_k \qquad (7)$$

Además de apoyarse Schrödinger en la ecuación (2) de la energía, usó las relaciones de De Broglie y Einstein

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad y \quad E = h\nu \qquad (8)$$

Como $k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow p = \frac{h}{2\pi} k \Rightarrow p = \hbar k \quad (9)$

Como $\nu = \frac{\omega}{2\pi} \Rightarrow E = \frac{h}{2\pi}\omega \Rightarrow E = \hbar\omega \quad (10)$

(6) y (9) $\Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial x^2} = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Psi_k \Rightarrow p^2 \Psi_k = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial x^2} \quad (11)$

(7) y (10) $\Rightarrow \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi_k \Rightarrow E \Psi_k = i\hbar \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} \quad (12)$

Como $E = K + U$, entonces

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \quad y$$

$$E \Psi_k = \frac{p^2}{2m} \Psi_k + U \Psi_k \qquad (13)$$

Usando (11) y (12) en (13):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_k}{\partial x^2} + U \Psi_k \qquad (14)$$

donde $\Psi_k = A_k e^{i(kx - \omega t)}$ es una de las componentes de un pulso asociado a una partícula libre para la que U es constante.

✓ Schrödinger postuló que la ecuación (14) también se cumple para cualquier partícula que tenga U no constante, es decir $U = U(x,t)$. Es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t)\, \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \qquad (15)$$

✓ Esta es la ecuación de Schrödinger en 1-D.

✓ La ecuación de Schrödinger no puede derivarse famalmente de otros principios básicos de la física.

✓ Ella es en sí un principio básico de la física que solamente puede ser postulado y confirmado mediante resultados experimentales como ha sido el caso.