LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER Y EL HAMILTONIANO CUÁNTICO

Se postula que la ecuación diferencial que resulta de hacer actuar el operador $\hat{H}_{(\vec{r},t)}$ de la energía total de un sistema dado sobre una de sus funciones propias dependientes del tiempo $\psi'(\vec{r},t)$ es la llamada **ecuación de Schrödinger**:

$$\boxed{\hat{H}_{(\vec{r},t)}\psi'(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi'(\vec{r},t)}{\partial t}}$$

Al operador de la energía total $\hat{H}_{(\vec{r},t)} = \hat{H}_{(x,y,z,t)}$ se le suele llamar **operador hamiltoniano** por analogía con su función correspondiente en la mecánica clásica y tiene la forma general:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{(x,y,z,t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\hat{V}_{(x,y,z,t)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{(x,y,z)}+\hat{V}_{(x,y,z,t)}\end{aligned}$$

donde $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{(x,y,z)}$ es el operador de la energía cinética y $\hat{V}_{(x,y,z,t)}$ el de la energía potencial, que suele tomar una forma funcional que depende del sistema al que se aplique.

Como se conoce, la solución de una ecuación diferencial se logra integrándola y así se encuentra su función originaria. La solución de esta ecuación diferencial es la función de onda y, por lo tanto, *la integración de la ecuación de Schrödinger del sistema nos permite calcular tanto la energía total del mismo como conocer su función de onda asociada*, a los efectos de la mecánica cuántica.

Obsérvese que el *hamiltoniano se adapta a cada sistema en dependencia de cómo se construya su operador de la energía potencial*.

La postulación de esta ecuación es la principal herramienta conque cuenta la mecánica cuántica para encontrar las funciones propias.

Cuando el potencial no depende del tiempo, la ecuación de Schrödinger admite soluciones para estados conocidos como estacionarios, donde se puede descomponer en factores con la componente dependiente del tiempo de la función en forma de:

$$\psi'(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}) e^{-\left(i/\hbar\right)Et}$$

donde E es una constante y $\psi(\vec{r})$ satisface la **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**:

$$\hat{H}_{\vec{r}}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

que es un caso típico de relación de valores y funciones (vectores) propias del operador hamiltoniano.

Al operador hamiltoniano independiente del tiempo lo expresaremos como:

$$\hat{H}_{(x,y,z)} \equiv \hat{H}_{\vec{r}} \equiv \hat{H}$$