$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

$\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$ Si $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

Conservación local de probabilidad

- $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ es una densidad de probabilidad
- La probabilidad $\mathrm{d}\mathcal{P}(\mathbf{r}, t)$ de encontrar a la partícula al tiempo t en un volumen infinitesimal $\mathrm{d}^3 r$ ubicado en el punto $\mathbf{r}$ es

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}^3 r$$

- Mostramos que la integral de $\rho(\mathbf{r}, t)$ sobre todo el espacio se mantiene constante pero esto no significa que $\rho(\mathbf{r}, t)$ deba ser constante en el tiempo.
- Análogo a una densidad de cargas de un sistema cerrado.
- En el caso de cargas tenemos la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0$$

- ¿Podemos encontrar algo similar para nuestro caso?
- Escribir la ecuación de Schrödinger en la base de posición para un potencial escalar y también su complejo conjugado.
- Multiplicar la ecuación para ψ por ψ^* y la de ψ^* por ψ
- Al sumarlas obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*\right]$$

o bien

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*\right]$$

- Si definimos

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi}[\psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi - \psi \boldsymbol{\nabla} \psi^*] \\ &= \frac{1}{m} \mathrm{Re}\left\{\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} \psi\right)\right\} \end{aligned}$$

Conservación Global

$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = cte$

Conservación local

$$\begin{aligned} \mathrm{div}\, \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{J} \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[(\boldsymbol{\nabla}\psi^*) \cdot (\boldsymbol{\nabla}\psi) + \psi^* \left(\boldsymbol{\nabla}^2 \psi\right) - (\boldsymbol{\nabla}\psi) \cdot (\boldsymbol{\nabla}\psi^*) - \psi \left(\boldsymbol{\nabla}^2 \psi^*\right)\right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \Delta \psi - \psi\, \Delta \psi^*\right] \end{aligned} \tag{D-18}$$

Onda plana

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

Solución $\psi(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\rho = |A|^2$, $\vec{J} = |A|^2 \frac{\hbar\vec{k}}{2m}$

$$\psi(\vec{r},t) = F(\vec{R})\,G(t)$$

$$i\hbar F\dot{G} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 F\, G$$

$$i\hbar\frac{\dot{G}}{G} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 F}{F} = \hbar\omega$$

$$i\hbar\dot{G} = \hbar\omega G \Rightarrow \vec{G} = e^{-i\omega t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 F = \hbar\omega F \quad \text{(Hemholtz)}$$

Evolución de los valores promedios de un observable

- Para un estado normalizado $|\psi(t)\rangle$ la evolución del valor esperado de un operador A está dada por

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle \tag{3}$$

- En este caso vemos que $\langle A\rangle(t)$ depende de t debido a la dependencia de $|\psi(t)\rangle$ que evoluciona de acuerdo a la Ec de Schrödinger.
- En un caso más general A podría depender explícitamente del tiempo causando una variación adicional de $\langle A\rangle(t)$ respecto a t.
- Vamos a estudiar la evolución $\langle A\rangle(t)$ y su relación con mecánica clásica.
- Derivando la Ec. 3 respecto a t

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\right]A(t)\,|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\,A(t)\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle\right] + \langle\psi(t)|\frac{\partial A(t)}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

- Usando la Ec de Schrödinger para $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|$ y $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|A(t)H(t) - H(t)A(t)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\partial A(t)}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

- Por lo tanto

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H(t)]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \tag{4}$$

- Entandamos cómo aparece la dependencia de $\langle A\rangle$ respecto a t
- Consideremos una cantidad clásica $\mathcal{A}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$. En mecánica clásica $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$ dependen de t y de esta forma $\mathcal{A}$ depende de t explícitamente e implíticamente a través de$\mathbf{r}$ y $\mathbf{p}$.
- A la cantidad clásica $\mathcal{A}$ le corresponde un operador $A = \mathcal{A}(\mathbf{R},\mathbf{P},t)$.
- La dependencia del tiempo de $\mathbf{r}$ y $\mathbf{p}$ ya no aparece en $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$ sino en el vector de estado $|\psi(t)\rangle$.
- En la representación $|\mathbf{r}\rangle$ el valor medio de A es

$$\langle A\rangle = \int \mathrm{d}^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\mathcal{A}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla},t)\psi(\mathbf{r},t)$$

al integrar respecto a $\mathbf{r}$ queda un número que sólo depende de t.

Los observables R y P (Teorema de Ehrenfest)

- Aplicaremos la ecuación 4 a los observables $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$ para una partícula en un potencial escalar
$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{R})$$
- Estos operadores no depende explícitamente del tiempo por lo que $\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} = 0$ y $\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = 0$
- entonces podemos escribir
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{R}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{R}, H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\mathbf{R}, \frac{P^2}{2m}\right]\right\rangle$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{P}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})]\rangle$$
- Calcular $\left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] = \frac{i\hbar}{m}\mathbf{P}$ usando $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ y las relaciones canónicas de conmutación $[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ji}$
- de Tarea $[\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{R})$
- Por lo tanto obtenemos
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{R}\rangle = \frac{1}{m}\langle \mathbf{P}\rangle$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{P}\rangle = -\langle \boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{R})\rangle$$