

Consecuencias de la ecuación de Schrödinger

- $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$

- Con dar $|\Psi(t_0)\rangle$ podemos obtener $|\Psi(t)\rangle \forall t$

Se puede dar como condición inicial cualquiera de estas

- $\langle \vec{p} | \Psi(t_0) \rangle = \Psi(\vec{p}, t_0)$ $\langle \vec{r} | \Psi(t_0) \rangle = \Psi(\vec{r}, t_0)$

o $|\Psi(t_0)\rangle$ directamente.

- La podemos escribir como $(i\hbar \frac{d}{dt} - H) |\Psi(t)\rangle = 0$

- Si tenemos dos soluciones $|\Psi_1(t)\rangle$, $|\Psi_2(t)\rangle$

$(i\hbar \frac{d}{dt} - H) \lambda_1 |\Psi_1(t)\rangle = 0$; $(i\hbar \frac{d}{dt} - H) \lambda_2 |\Psi_2(t)\rangle = 0$

$\Rightarrow (i\hbar \frac{d}{dt} - H) (\lambda_1 |\Psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\Psi_2(t)\rangle) = 0$

$\therefore \lambda_1 |\Psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\Psi_2(t)\rangle$ es solución también

\Rightarrow Podemos hablar de un operador de evolución temporal

$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$

- Podemos empezar a sospechar que $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)}$

operador
↓
 $-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)$

Conservación de la probabilidad

Si $\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$, ¿Pasará que $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$?

Queremos ver si $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left[\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right]$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H$$

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = -\frac{1}{i\hbar} H | \psi(t) \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle = 0$$

$\therefore \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \text{constante.}$

En la representación de posición

$$\Rightarrow \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad \forall t \quad \left(\text{Suponiendo } \int |\psi(\vec{r}, t_0)|^2 d^3r = 1 \right)$$

Esto es una ley de conservación global.

¿Habrá una local como $\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0$ como en el caso de cargas?

Si definimos $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t)) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \right) \psi^*(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) \right)$$

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \right\} = \left[\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi \right] \psi^* - \psi \left[\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi^* \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left[-(\nabla^2 \psi) \psi^* + \psi (\nabla^2 \psi^*) \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi \right]$$

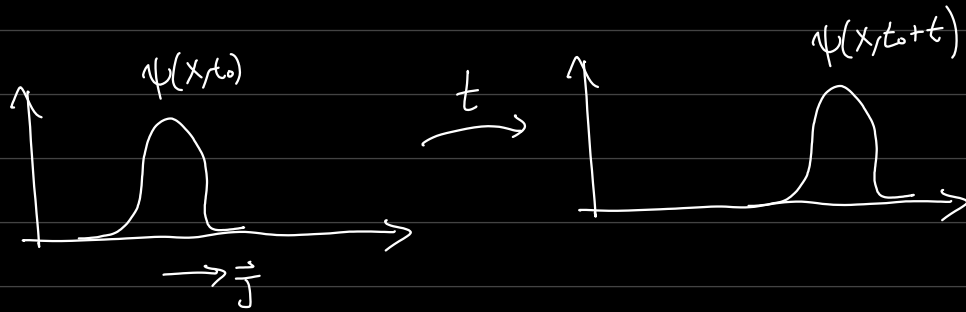
Si definimos

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right]$$

Corriente de probabilidad

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\cancel{(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi)} + \psi^* \nabla^2 \psi - \cancel{(\vec{\nabla}\psi) \cdot (\vec{\nabla}\psi^*)} - \psi (\nabla^2 \psi^*) \right]$$

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



Ejemplo

Partícula libre $H = \frac{p^2}{2m}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$$\rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left[A^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} A i\vec{k} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} A^* (-i\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right]$$

$$= \frac{\hbar \vec{k}}{2m} [2|A|^2]$$

Evolución temporal del valor promedio de un observable.

- La evolución temporal de un valor esperado está dada por

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \dots (1)$$

- En general, el operador A podría depender explícitamente del tiempo.

- Buscamos una ecuación de evolución para $\langle A \rangle(t)$

- Derivando (1) respecto a t

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

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H$$

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = -\frac{1}{i\hbar} H | \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left[\langle \psi(t) | \underline{A} H | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | H \underline{A} | \psi(t) \rangle \right] + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Caso particular: los observables \vec{R} y \vec{P} para una partícula en un potencial (Teorema de Ehrenfest)

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{R})$$

En este caso $\frac{\partial \vec{R}}{\partial t} = 0$ y $\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = 0$.

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, \frac{p^2}{2m}] \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle$$

$$[\vec{R}, \frac{p^2}{2m} + V(\vec{R})] = [\vec{R}, \frac{p^2}{2m}] + [\vec{R}, V(\vec{R})]$$

Recordando que $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

$$[\vec{R}, \frac{p^2}{2m}] = \frac{i\hbar}{m} \vec{P} \quad (\text{usando } [R_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, V(\vec{R})] \rangle = -\langle \nabla V(\vec{R}) \rangle$$

Obtuvimos



Paul Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{R}) \rangle$$

derivando la de arriba y enchufando la de abajo

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{R} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{R}) \rangle$$

2a ley de Newton.