Clases 17: *Formalismo de Schrödinger-Mecánica ondulatoria-2da parte*

Clase 18: *Ecuación de Schrödinger - Teorema de Ehrenfest - Límite clásico - Corriente de Probabilidad*

En la clase anterior comenzamos a desarrollar el formalismo de Schrödinger, entendiendo que es un formalismo matemático que incluye las hipótesis que surgieron de la experiencia, y nos va a permitir, al menos formalmente, resolver e interpretar fenómenos cuánticos. En esta clase vamos a ver quizá los puntos más importantes. En particular, hemos venido hablando de la función de onda, como esa función que contiene toda la información sobre nuestro sistema (por eso la llamamos también el *estado* del sistema) y que nos permite calcular las probabilidades y valores medios del sistema. Pero, la pregunta fundamental es, *de dónde sacamos la función de onda?*

Antes de responder a esa pregunta, vamos a ver algunas consecuencias y características de la mecánica cuántica.

- ***Proceso de medición***

En la clase anterior encontramos que, para que un sistema tenga bien definido un observable físico, debe tener asociado una función de onda que sea autofunción de ese observable. Y los únicos valores posibles que puede tomar ese observable (los únicos que podemos obtener de una medición) son sus autovalores:

$$\boxed{\hat{F}\psi_i = \langle F\rangle_i \psi_i = f_i\psi_i}$$

donde $\{\psi_i\}$ es el conjunto de autofunciones del observable $\hat{F}$, y los valores $\langle F\rangle_i = f_i$ son los autovalores (=valores posibles-el espectro) de $\hat{F}$, que corresponden a los valores medios de $\hat{F}$ calculados con las autofunciones $\{\psi_i\}$. También vimos que el conjunto de autofunciones de $\hat{F}$ es una base del espacio.

Pero, qué pasa si tengo un sistema cuya función de onda asociada no es autofunción de $\hat{F}$? Qué valor de $\hat{F}$ vamos a medir?

Un estado que no es autofunción lo llamamos *estado mixto*. Sea ϕ ese estado. Como las autofunciones de $\hat{F}$ forman base, podemos escribir al estado ϕ como combinación lineal de $\{\psi_i\}$:

$\phi = \sum_i c_i\psi_i$ donde $\{c_i\}$ son los coeficientes de la combinación lineal, que pueden ser números complejos.

Calculemos el valor medio de $\hat{F}$ para este estado:

$$\langle \hat{F}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\hat{F}\phi d^3x = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\sum_j c_j^*\psi_j^*\hat{F}\sum_i c_i\psi_i\right]d^3x = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\sum_j\sum_i c_j^*c_i\psi_j^*\hat{F}\psi_i\right]d^3x =$$

$$= \sum_j\sum_i c_j^*c_i\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_j^*\underbrace{\hat{F}\psi_i}_{f_i\psi_i}\right]d^3x = \sum_j\sum_i c_j^*c_i f_i\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_j^*\psi_i d^3x}_{\delta_{ij}} = \sum_i c_i^*c_i f_i = \sum_i |c_i|^2 f_i$$

Encontramos que el valor medio de $\hat{F}$ para este estado mixto ϕ es:

$$\boxed{\left\langle \hat{F} \right\rangle = \sum_i |c_i|^2 f_i} \qquad (1)$$

- Cómo interpretamos este resultado? Cualquier valor medio lo calculamos como:

$$\left\langle F \right\rangle = \sum_i p_i f_i \qquad (2)$$

donde $p_i \equiv$ probabilidad de medir f_i, y estos son los valores posibles de la magnitud *F*. Comparando (2) con nuestro resultado (1), vemos que, en un estado mixto, tengo probabilidad $|c_i|^2$ de medir el valor f_i. Es decir, solo puedo medir los valores de $\hat{F}$ que corresponden a las autofunciones que forman parte de la combinación lineal, y estos, con probabilidad $|c_i|^2$.

- Qué pasa después de la medición? Recalquemos, otra vez, que solo puedo medir los valores que $\hat{F}$ puede tomar, es decir, sus autovalores. Supongamos que medimos y encontramos que nuestro sistema tiene un valor f_n. Una vez realizada la medición, ya no hay diferentes probabilidades para diferentes valores de $\hat{F}$. Ahora tenemos la certeza (es decir, probabilidad = 1) de que nuestro sistema tiene el valor f_n (es lo que medimos). Entonces, después de la medición, también tenemos la certeza de que el sistema va a tener asociada la función de onda que corresponde a ese autovalor, es decir, ψ_n. Ese era el estado de nuestro sistema *antes* de la medición? No podemos saberlo. Solo podemos asegurar que, si estaba en un estado mixto, ψ_n formaba parte de la combinación lineal. Decimos que, al medir, proyectamos la función de onda de partida en la autofunción de $\hat{F}$ que corresponde al autovalor medido. El sistema, a partir de la medición, va a seguir en el estado ψ_n.

- ***Relación de incerteza general***

A partir de las propiedades de los paquetes de onda vimos que Heisenberg postuló que ciertos observables físicos no se pueden determinar simultáneamente con total certeza. Así, llegamos a que:

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar}$$

$$\boxed{\Delta t \Delta E \geq \hbar} \quad \text{(cf. clase 15)}$$

donde, recordemos, estas relaciones están acotadas por abajo, pero $\hbar$, en este caso, no indica una cota inferior exacta, sino un orden de magnitud.

- Vamos a encontrar ahora una relación de incerteza general.

Supongamos dos observables $\hat{A}$ y $\hat{B}$. Sin perder generalidad, establezcamos que:

$$\left.\begin{array}{l} \left\langle \hat{A} \right\rangle = 0 \\ \left\langle \hat{B} \right\rangle = 0 \end{array}\right\} \text{ esto equivale a redefinir el cero de nuestro aparato de medida.} \quad (3)$$

Lo que queremos calcular es cuánto vale la incerteza entre estos dos observables. Eso lo vamos a determinar calculando $\sigma_A \sigma_B$, donde σ es la dispersión.

Vamos a usar un operador auxiliar, que no significa nada ni es hermítico:

$\hat{O} = \alpha\hat{A} + i\hat{B}$ donde $\alpha \in \mathbf{R}$

Vamos a calcular:

$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\hat{O}\psi\right|^2 d^3x \geq 0$ ya que el integrando es definido positivo.

$$0 \leq \int_{-\infty}^{\infty} \left|\hat{O}\psi\right|^2 d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{O}\psi\right)^* \left(\hat{O}\psi\right) d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\alpha\hat{A}^* - i\hat{B}^*\right)\psi^*\right]\left[\left(\alpha\hat{A} + i\hat{B}\right)\psi\right] d^3x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^2 \left(\hat{A}^*\psi^*\right)\left(\hat{A}\psi\right) d^3x + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{B}^*\psi^*\right)\left(\hat{B}\psi\right) d^3x - i\alpha\int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{B}^*\psi^*\right)\left(\hat{A}\psi\right) d^3x + i\alpha\int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{A}^*\psi^*\right)\left(\hat{B}\psi\right) d^3x$$

donde los paréntesis indican que cada operador está actuando sobre la función dentro del paréntesis. Como los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son hermíticos:

$\hat{A}^* = \hat{A}^t$ y $\hat{B}^* = \hat{B}^t$

Entonces, apliquemos la operación de transponer:

$$0 \leq \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A}\hat{A}\psi \, d^3x + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{B}\hat{B}\psi \, d^3x + i\alpha\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\right)\psi \, d^3x =$$

$$= \alpha^2 \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle + \left\langle \hat{B}^2 \right\rangle + i\alpha \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle$$

Ahora bien, las dispersiones cuadráticas media de $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son:

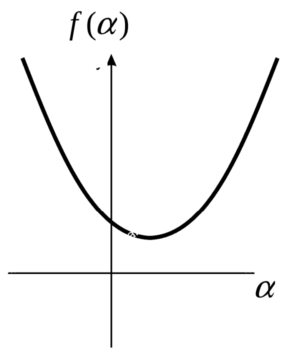
$$\sigma_A^2 = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle$$

$$\sigma_B^2 = \left\langle \hat{B}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{B} \right\rangle^2 = \left\langle \hat{B}^2 \right\rangle$$

por la condición (3). Por otra parte, como probaron en la clase anterior $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}$, con $\hat{C}$ hermítico. Entonces:

$$0 \leq \alpha^2 \sigma_A^2 + \sigma_B^2 - \alpha \left\langle \hat{C} \right\rangle$$

Esta expresión vale para todo α, por lo tanto, podemos considerar que es una función cuadrática de α que está totalmente sobre el eje de las abcisas.



Esto nos impone restricciones sobre σ_A y σ_B, pues debe tener una única raíz real o raíces complejas, es decir:

$$\alpha_{1,2} = \frac{\left\langle \hat{C} \right\rangle \pm \sqrt{\left\langle \hat{C} \right\rangle^2 - 4\sigma_A^2\sigma_B^2}}{2\sigma_A^2}$$

El discriminante tiene que ser ≤ 0:

$$\left\langle \hat{C} \right\rangle^2 - 4\sigma_A^2\sigma_B^2 \leq 0 \Rightarrow \boxed{\sigma_A\sigma_B \geq \frac{\left|\left\langle \hat{C} \right\rangle\right|}{2} = \frac{\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|}{2}} \qquad (4)$$

Ahora sí obtuvimos una cota mínima exacta. Por ejemplo:

$$\left[x, p_x\right] = i\hbar \Rightarrow \sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Por supuesto debe entenderse que este es el mínimo valor posible. Es decir, cada caso particular puede tener su propia incerteza, pero nunca va a ser más chica que esta.

- De esta relación de incerteza general se ve claramente que aquellos observables que conmutan pueden estar bien definidos simultáneamente. Es decir, puedo hacer mediciones de ellos simultáneas tal que sus dispersiones valgan cero. Y, tal como vimos en la clase anterior, un sistema puede tener asociada una función de onda que tenga ambas magnitudes bien definidas, ya que comparten autofunciones.

- ***Ecuación de Schrödinger***

Hasta ahora, todo esto es lo que hemos venido desarrollando y se vio cómo la función de onda $\psi(\vec{x},t)$ contiene información sobre el estado del sistema tal $|\psi(\vec{x},t)|^2$ representa la densidad de probabilidad de que el sistema se encuentre en un cierto estado y cómo cualquier variable dinámica se representa por un operador hermítico con ciertas propiedades. Sin embargo, la gran pregunta es:

Todo muy bien, pero… ¿De dónde sacamos $\psi(\vec{x},t)$ *?*

"Si estamos hablando de ondas, tiene que haber una ecuación de ondas:"

Esto es justamente lo que cuenta Félix Bloch en esta anécdota, que parece ser el disparador para lo que vino después:

> *Al final de un coloquio, oí decir a Debye algo parecido a esto:*
> ***"Schrödinger, realmente usted no está ahora mismo trabajando en un tema de verdadera importancia … ¿por qué no nos expone la tesis de De Broglie, que parece haber atraído la atención de algún sector?".*** *Así, en un coloquio posterior, Schrödinger dio una bellísima explicación de cómo De Broglie asoció una onda con una partícula y cómo obtuvo las reglas de cuantización… exigiendo que una órbita estacionaria tuviera un número entero de longitudes de onda. Cuando Schrödinger hubo terminado, Debye observó que esta manera de hablar era un tanto pueril …* ***Para tratar apropiadamente con ondas, debemos tener una ecuación de ondas.***
>
> Félix Bloch, *Discurso en la American Physical Society (1976)*

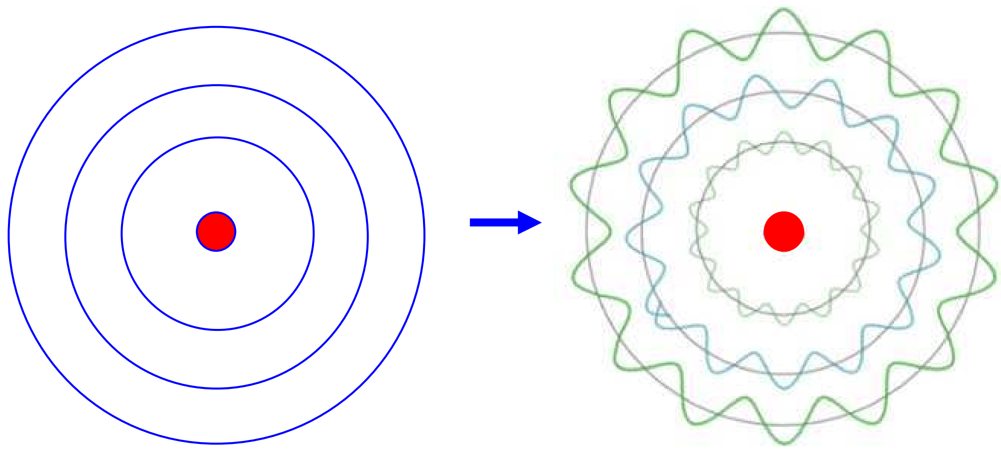
Así nace la Ecuación de Schrödinger…

Vimos que el problema del átomo de hidrógeno de Bohr era equivalente al tener ondas estacionarias. De esta manera, de Broglie logra enumerar los niveles del átomo de H que se adecuan a los datos de la espectroscopía. Volvamos un poco para atrás:

Según Bohr: órbitas "estacionarias" (¿?), aplicando el principio de correspondencia $\Rightarrow$ $L_n = n\hbar$

Según de Broglie: relaciones de cuantización $\Rightarrow$ condiciones de ondas estacionarias

Bohr ***De Broglie***



órbitas "estacionarias" (¿?) $\Rightarrow \quad L_n = n\hbar$

ondas estacionarias $L_n = n\hbar \quad \Rightarrow \quad 2\pi\, r = n\lambda$

Lo que hace Schrödinger es intentar poner en forma de ecuación de ondas las ideas de de Broglie. El punto de partida es la ecuación clásica de D'Alambert que dice que, por ejemplo, para una cuerda vibrante con sus extremos atados (lo importante es que no se tenga al tiempo en consideración), la ecuación es ésta:

Ondas estacionarias: ecuación de D'Alambert

$$\nabla^2\phi(\vec{x}) + k^2\phi(\vec{x}) = 0$$

La ecuación, incluyendo al tiempo, admite como solución:

$$\psi(\vec{x},t) = e^{-i\omega t}\phi(\vec{x})$$

Entonces, qué es lo que vamos a hacer? Partiendo de la ecuación de D'Alambert, incluyamos la relación de de Broglie:

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

Entonces:

$$\nabla^2\phi(\vec{x}) + \frac{p^2}{\hbar^2}\phi(\vec{x}) = 0$$

Si la partícula se mueve en un campo conservativo:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad \Rightarrow \quad p^2 = 2m\left(E - V(\vec{x})\right)$$

Entonces:

$$\nabla^2\phi(\vec{x}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(\vec{x})\right)\phi(\vec{x}) = 0$$

Reordenando, obtenemos la ***ecuación de Schrödinger para el caso estacionario***:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x})+V(\vec{x})\phi(\vec{x})=E\phi(\vec{x})}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{x})=\hat{H}} \Rightarrow \text{operador “hamiltoniano”}$$

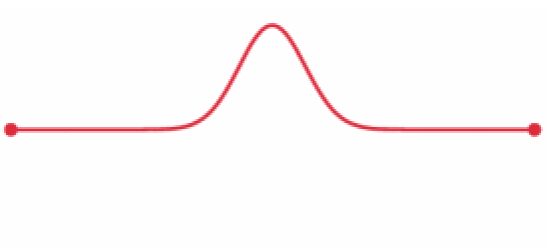
¡Todo cierra! Recordemos que $\hat{p}^2=-\hbar^2\nabla^2$ y, por lo tanto, lo que estamos obteniendo, a partir de esta ecuación de ondas estacionaria, es un problema de autovalores de un operador “energía”:

Pero este no es el caso más general …

La ecuación de D'Alambert es un caso particular de la ***ecuación de ondas***:

$$\nabla^2\psi(\vec{x},t)-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\vec{x},t)=0$$

que incluye tanto las soluciones estacionarias como no estacionarias. La ecuación de D'Alambert describe bien los modos normales de vibración, pero no describe cuando hay un pulso así:



Por ejemplo:

Mantiene la forma y se propaga de uno a otro extremo.

¿Entonces? La misma limitación tiene la ecuación de Schrödinger estacionaria… vale solo para ***estados estacionarios*** ($\doteq$ ondas estacionarias), pero no vale para estados más generales.

¿Cómo hacemos? Vamos a hacer lo que ya se había hecho muchas veces a lo largo de la “prehistoria” de la mecánica cuántica:

- Partimos de un *caso particular* $\Rightarrow$ *para llegar al caso general*
- Ensayemos: partamos de *D'Alambert* $\Rightarrow$ *para llegar a la ecuación más general de ondas*

Qué es lo que vemos: ω no está bien definida $\Rightarrow$ tiene que desaparecer!

Entonces:

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{\omega}{c}$$

Reemplazando en la ec. de D'Alambert:

$$\nabla^2\phi(\vec{x})+\frac{\omega^2}{c^2}\phi(\vec{x})=0$$

Multiplicando por $e^{-i\omega t}$:

$$\nabla^2\underbrace{\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}}_{\psi(\vec{x},t)}+\underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}}_{-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\vec{x},t)}=0 \Rightarrow$$

los modos normales también satisfacen esta ecuación

Si esto vale para los modos normales, también tiene que valer en general, o sea, cuando ω no esté bien definida.

- Hagamos lo mismo con la ec. de Schrödinger. Dónde está ω?

Como $E = \hbar\omega \Rightarrow$ tiene que desaparecer esa dependencia!

- Sigo los mismos pasos que en el caso anterior:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})$$

Multiplicando por $e^{-i\omega t}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\underbrace{\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}}_{\psi(\vec{x},t)} + V(\vec{x})\underbrace{\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}}_{\psi(\vec{x},t)} = \hbar\underbrace{\omega\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}}_{i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)}$$

Entonces:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x},t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)}$$

Esta es ***la ecuación de Schrödinger más general (caso estacionario y no estacionario)***

- Notemos:

❖ $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \underbrace{\Rightarrow}_{(i\,de\,t)} \hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})$$

es una ecuación de autovalores ($e^{-i\omega t}$ se factoriza)

❖ Estados estacionarios: $\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x})e^{-i\omega t}$

❖ $\hat{H}\psi(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) \Rightarrow \hat{H} = \underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}_{} \equiv operador\ \ Hamiltoniano$ se ve porqué $\Delta E\,\Delta t \approx \hbar$

❖ Para un estado estacionario:

$$\left\langle\hat{A}\right\rangle(t) = \int\psi^*(\vec{x},t)\hat{A}\,\psi(\vec{x},t)\,d^3x = \int\phi^*(\vec{x})e^{i\omega t}\hat{A}\,\phi(\vec{x})e^{-i\omega t}d^3x$$
$$= \int\phi^*(\vec{x})\hat{A}\,\phi(\vec{x})d^3x = \left\langle\hat{A}\right\rangle(t=0) \qquad i\ de\ t$$

Esto muestra porqué hablamos de estados estacionarios: los valores medios son independientes del tiempo.

- ***Ecuación de evolución de $\left\langle\hat{A}\right\rangle$ y constantes de movimiento***

Apliquemos la ecuación de Schrödinger para encontrar, en general, cómo evoluciona en el tiempo el valor medio de un observable. Calculemos:

$$\frac{d\left\langle\hat{A}\right\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int_{\forall\vec{x}}\psi^*\hat{A}\,\psi\,d^3x =$$
$$= \int_{\forall\vec{x}}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\,\psi\,d^3x + \int_{\forall\vec{x}}\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\,d^3x + \int_{\forall\vec{x}}\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\,d^3x$$

- Usando Schrödinger:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi \qquad \text{y} \qquad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\psi^*$$

$$\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\int_{\forall \vec{x}} \left[(\hat{H}^*\psi^*)\hat{A}\psi - \psi^*\hat{A}\,\hat{H}\psi \right] d^3x + \int_{\forall \vec{x}} \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d^3x$$

Como H es hermítico, $H^* = H^t \Rightarrow$ está aplicado sobre ψ^* y no está aplicado sobre $\hat{A}\psi \Rightarrow$ lo damos vuelta:

$$\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\int_{\forall \vec{x}} \left[\psi^*\hat{H}\hat{A}\psi - \psi^*\hat{A}\hat{H}\psi \right] d^3x + \int_{\forall \vec{x}} \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d^3x$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{\forall \vec{x}} \left[\psi^*(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})\psi \right] d^3x + \int_{\forall \vec{x}} \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d^3x$$

$$\boxed{\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H},\hat{A}] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle} \quad \text{ecuación de evolución}$$

- *En mecánica cuántica,* $\hat{A}$ *constante de movimiento* $\Rightarrow \frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = 0$

Entonces, debe darse:

- $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ ($\hat{A}$ es independiente del tiempo – generalmente es así en el formalismo de Schrödinger)
- $[\hat{H},\hat{A}] = 0 \ \Rightarrow$ operadores que conmutan con $\hat{H}$

Consecuencias:

Si $\hat{A}$ cte de movimiento:

- $\langle \hat{A}\rangle$ independiente del tiempo.
- $\hat{A}$ y $\hat{H}$ pueden estar bien definidas simultáneamente (recordar $\sigma_A\sigma_B \geq \frac{|\langle [A,B]\rangle|}{2}$)

$\hat{A}$ y $\hat{H}$ tienen un *conjunto* de autofunciones comunes. Esto es muy importante, ya que, como en mecánica clásica, en mecánica cuántica usamos las constantes de movimiento para resolver un problema. También, como en mecánica clásica, vamos a ver que cada constante de movimiento está relacionada con una propiedad de simetría del sistema. Por lo tanto, dado un problema, se pueden buscar las constantes de movimiento buscando qué operadores conmutan con $\hat{H}$ o cuáles son las propiedades de simetría del sistema. Entonces, vamos a plantear:

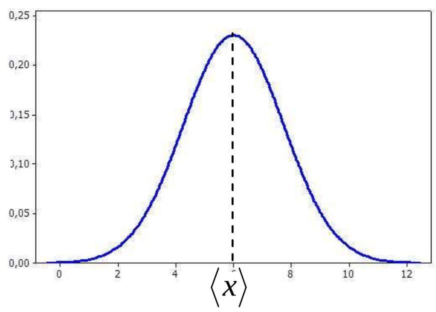
$$\hat{H}\psi = E\psi$$
$$\hat{A}\psi = A\psi$$

y, en general, el estado del sistema va a quedar especificado por el valor de la energía y de las constantes de movimiento. (Cuidado: vamos a ver que esto tiene algunas restricciones).

- *Una aplicación de la ecuación de evolución…*

El límite clásico de la mecánica cuántica. Teorema de Ehrenfest

Sea $\psi(x,t)$ la función de onda (en una dimensión) que describe el estado de la partícula, $\langle x \rangle$ el centro del paquete, y $\langle x \rangle(t)$ la trayectoria seguida por el centro del paquete (<u>no</u> la de la partícula! ya sabemos que no podemos hablar de "trayectoria de una partícula", cuyo estado está descripto por el paquete como un todo, que, inevitablemente, tiene una cierta extensión espacial.



- Dejo como *Ejercicio*, Mostrar que (de las 2 formas, de primeros principios y usando la ecuación de evolución)

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{d\langle x \rangle}{dt} = \dfrac{1}{m}\langle p_x \rangle \\ \dfrac{d\langle p_x \rangle}{dt} = -\left\langle \dfrac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle = \langle F_x \rangle \end{array}\right\} \dfrac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = \dfrac{1}{m}\langle F_x \rangle$$

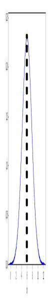
Estas ecuaciones parecen las ecuaciones clásicas en promedio…

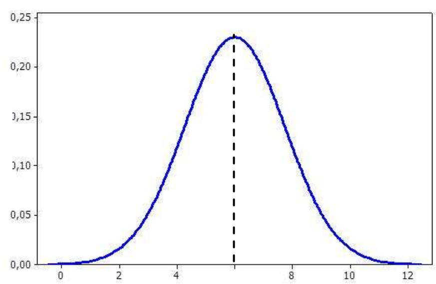
- *Pregunta (capciosa…)*:

El centro del paquete, $\langle x \rangle$, *¿obedece entonces ecuaciones clásicas? Se comporta clásicamente?*
Respuesta: ***¡No!*** Veamos por qué

$$\underbrace{\langle F_x \rangle}_{F_x \ promediado \ sobre \ \Delta x} \neq \underbrace{F_x\big|_{x=<x>}}_{F_x \ aplicada \ sobre \ <x>}$$

Caso límite: si $\Delta x <<$ otras distancias involucradas, se puede aproximar el paquete por su centro e ignorar el principio de incerteza. En ese caso, no hay diferencia apreciable entre la descripción clásica y la cuántica de la partícula. Estamos en lo que se llama el "límite clásico".





- *Algo ¿contradictorio? con lo anterior: Cámara de niebla*

En física de partículas se usa un dispositivo que se llama cámara de niebla (o, eventualmente, de burbujas) para visualizar el paso de partículas subatómicas. Es un compartimento cerrado que se lo llena de niebla (es decir, pequeñas gotas de agua en suspensión) y se hacen pasar partículas subatómicas por su interior. A su paso, estas partículas van desprendiendo electrones de las gotitas de agua (las ionizan) y por lo tanto, se observa un rastro brillante (formado por las gotitas ionizadas) que va mostrando por dónde pasa la partícula subatómica. La pregunta es. Dijimos que no se pueden definir trayectorias para estos entes. Pero, no es esto la trayectoria de la partícula? Se los dejo para pensar ….

- ***Corriente de probabilidad (Max Born – 1926)***

Jugó un papel central en la aceptación de la interpretación probabilística de la función de onda.

- Vamos a encontrar algunas propiedades de la densidad de probabilidad $\rho(\vec{x},t)$:

$$\Rightarrow \rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2$$

$$\Rightarrow \int_{\forall \vec{x}} \rho(\vec{x},t)\, d^3x = 1 \quad \Rightarrow$$

como función del tiempo, no tiene por qué estar igualmente repartida en todo el espacio $\forall t \Rightarrow$ *puede desplazarse como un fluido sujeto a la condición* $m = cte$ *(en este caso, será probabilidad sobre todo el espacio = cte)*

Los fluidos o la carga eléctrica satisfacen una ecuación de continuidad que dice que, punto a punto, todo el fluido (la carga) que entra, sale (por conservación de la masa o de la carga)

$$\boxed{Conservación \begin{Bmatrix} m \\ q \\ probabilidad\ (?) \end{Bmatrix} \begin{matrix} ecuación\ de\ continuidad \\ \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla . \vec{J} = 0 \end{matrix}}$$

- Veamos si podemos encontrar una ecuación de continuidad para la probabilidad. Tenemos que "fabricarnos" una $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \psi^* \dfrac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \dfrac{\partial \psi^*}{\partial t}$
- Partiendo de la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V\psi$$

Multiplico por ψ^*:

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^* \nabla^2 \psi + \psi^* V \psi \qquad (5)$$

Conjugando esta ecuación, resulta:

$$-i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi \nabla^2 \psi^* + \psi^* V \psi \qquad (6)$$

donde $V \in \boldsymbol{R}$ (salvo que haya un campo magnético $\vec{B}$). Restando (5)-(6):

$$i\hbar \underbrace{\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right]}_{\frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*\right]$$

El laplaciano es la divergencia del gradiente:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}[\psi^* \nabla . (\nabla \psi) - \psi \nabla . (\nabla \psi^*)]$$

- Usamos la siguiente identidad vectorial:

$$\nabla.(\lambda\vec{A}) = \lambda\nabla.\vec{A} + \vec{A}.\nabla\lambda \quad \Rightarrow \quad \lambda\nabla.\vec{A} = \nabla.(\lambda\vec{A}) - \vec{A}.\nabla\lambda$$

con lo que:

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\underbrace{\psi^*\nabla.(\nabla\psi)}_{\nabla.(\psi^*\nabla\psi)-\nabla\psi.\nabla\psi^*} - \underbrace{\psi\nabla.(\nabla\psi^*)}_{\nabla.(\psi\nabla\psi^*)-\nabla\psi^*\nabla\psi}\right]$$

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla.(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \underbrace{(\nabla\psi^*.\nabla\psi - \nabla\psi.\nabla\psi^*)}_{=0}\right]$$

- Finalmente:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\nabla.(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

con lo que, queda definido la *densidad de corriente de probabilidad* $\vec{J}$:

$$\boxed{\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)}$$

y la ecuación de continuidad:

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla.\vec{J} = 0}$$

- Extraña forma la de $\vec{J}$, ¿no? Interpretemos:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \\ &= \frac{1}{2m}[\psi^*(-i\hbar\nabla)\psi + \psi(i\hbar\nabla)\psi^*] \\ &= \frac{1}{2m}[\psi^*\,\hat{\vec{p}}\,\psi + \psi\,\hat{\vec{p}}\,\psi^*] = \frac{1}{2}\left[\psi^*\frac{\hat{\vec{p}}}{m}\psi + (\psi^*\frac{\hat{\vec{p}}}{m}\psi)^*\right]\end{aligned}$$

- Entonces:

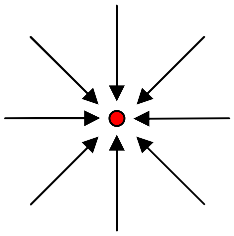
$$\boxed{\vec{J} = \mathrm{Re}\left[\psi^*\frac{\hat{\vec{p}}}{m}\psi\right]}$$

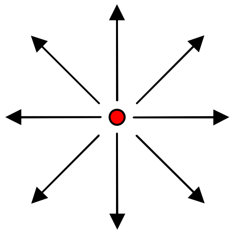
Forma "mecano cuántica" de densidad de corriente: densidad (de probabilidad = $\frac{d^3N}{Nd^3x}$ ≡ fracción de partículas por u de V) por la velocidad (operador) con que se desplaza. Estadísticamente está representando el ***flujo de partículas.***

- Volviendo a la *ecuación de continuidad:*

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla.\vec{J} = 0$$

como dijimos, representa la conservación (en este caso) de la probabilidad en forma diferencial. La div de un campo vectorial en un punto es el flujo de ese campo vectorial por unidad de volumen, cuando el volumen tiende a 0. Por lo tanto, si $\nabla \cdot \vec{J} > 0$, las líneas de corriente se alejan del punto y la densidad disminuye. Lo contrario, si $\nabla \cdot \vec{J} < 0$, las líneas confluyen al punto y aumenta la densidad.





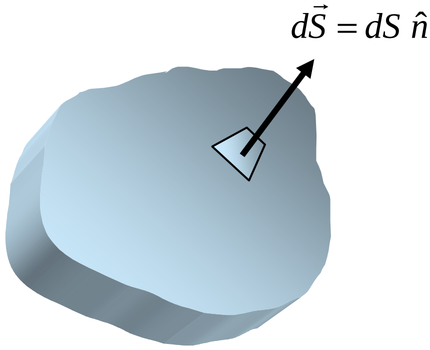
$\boxed{\nabla.\vec{J} < 0 \Rightarrow \rho \ aumenta}$ $\boxed{\nabla.\vec{J} > 0 \Rightarrow \rho \ decrece}$

- Integrando sobre un volumen *V*:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3x = -\int_V \nabla.\vec{J}\ d^3x$$

Por el teo de la divergencia:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\ d^3x = -\oiint_{S(V)} \vec{J}.d\vec{S}$$



donde: $\begin{cases} \int_V \rho\ d^3x \equiv prob.\ de\ encontrar\ una\ \ part.\ en\ V \\ -\oiint_{S(V)} \vec{J}.d\vec{S} \equiv flujo\ entrante - \ flujo\ saliente \end{cases}$

Entonces, se puede interpretar esto, desde un punto de vista estadístico como que:

- *La probabilidad de encontrar una partícula dentro de un recinto va variando con el tiempo debido a la fracción de partículas que entran o salen del recinto.*

Ejemplo: $\vec{J}$ para una partícula libre cuya función de onda sea una onda plana (no es una "buena función de onda, pero va a ser útil cuando resolvamos problemas en una dimensión. Además, puede considerarse como una componente de un paquete de ondas.)

$$\psi(\vec{x},t) = Ae^{i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)} \text{ con } \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

$$\vec{J}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}[A^* e^{-i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)}(i\vec{k})Ae^{i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)} - \\ - Ae^{i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)}(-i\vec{k})A^* e^{-i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)}]$$

$$\boxed{\vec{J}(\vec{x},t) = |A|^2 \frac{\hbar\vec{k}}{m}}$$

Notar que es i de   *t* $\Rightarrow$ *estacionario*

Este resultado es justamente que la corriente es el producto de la densidad por la velocidad que tiene la partícula cuyo impulso es $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (recordar que la onda plana está totalmente delocalizada).

- ***Condiciones de contorno de la función de onda***

➢ $\vec{J}$ nos da información sobre las condiciones de contorno que debe cumplir la función de onda. Si bien hay métodos más "ortodoxos" para determinar dichas condiciones (Teórica 2), podemos determinar dichas condiciones de contorno, no en forma tan precisa y elegante, pero sí con sentido físico.

➢ Por ejemplo, supongamos una partícula que se está moviendo en un campo de fuerzas cuyo potencial $V(x)$ es discontinuo (esto es una aproximación, ya vamos a ver en qué casos es válida!)

$\Rightarrow$ El flujo de probabilidad al atravesar una discontinuidad tiene que ser continuo: tanta probabilidad entra a esa zona del espacio como sale (no puede quedar probabilidad "atrapada" en la discontinuidad) $\Rightarrow$ $\vec{J}$ debe ser una función continua $\Rightarrow$ por la forma funcional de $\vec{J}$, entonces ψ y $\nabla\psi$ deben ser continuas. Con esto, ya tenemos los elementos necesarios y suficientes para encarar problemas de mecánica cuántica.