

- 3] Para empezar recordemos que en cuántica la descripción del estado de un sistema físico viene dado por su función de onda ψ y los resultados de realizar mediciones sobre el mismo (como por ejemplo conocer su posición o momento) no están predeterminados sino que se obtienen distintos valores con cierta probabilidad. Así, la densidad de probabilidad ρ (probabilidad por unidad de volumen) de observar al sistema en la posición \mathbf{x} en el instante t viene dada por

$$\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

o sea que la probabilidad de encontrar al sistema en la región $V \subseteq \mathbb{R}^3$ viene dada por $P(V, t) = \int_V |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x}$ y como el sistema debe encontrarse en alguna parte de todo el espacio tenemos que

$$P(\mathbb{R}^3, t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = 1. \quad (2)$$

Por otro lado, la evolución del estado del sistema, es decir, de la función de onda, viene dada por la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{x}, t)\right)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)\right)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5)$$

donde $\hat{H}(t)$ es el operador hamiltoniano del sistema y $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ el operador de impulso lineal. Evidentemente para que esta descripción tenga sentido es necesario que la ecuación (2) se verifique para todo tiempo a lo largo de la evolución temporal, es decir, que la probabilidad se conserve. Esto podría darse de dos maneras: una conservación meramente global o una conservación local. Un ejemplo de conservación global en 1 dimensión sería que inicialmente el sistema esté con probabilidad 1 en el intervalo $[0, 1]$ y al instante siguiente se halle con probabilidad 1 en el intervalo $[2, 3]$, siempre teniendo probabilidad 0 de hallarse en el intervalo $[1, 2]$ (o sea sin “pasar” por este intervalo). En este caso la ley de conservación sería simplemente la ecuación (2). La otra posibilidad es que la conservación sea local, es decir, que la probabilidad “fluya” suavemente a lo largo del espacio y el tiempo de manera similar a lo que ocurre con la carga en el electromagnetismo. En ese caso la ley de conservación vendrá dada por una ecuación de continuidad de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (6)$$

donde $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$ será una corriente de probabilidad (análoga a la corriente eléctrica que transporta carga). Esto es en efecto lo que deberíamos esperar, dado que la evolución de la función de onda viene dada por una ecuación local como es la de Schrödinger. Probemos entonces esto y encontremos quién es \mathbf{J} usando la definición de densidad de probabilidad

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^* + \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (7)$$

Usando la ecuación de Schrödinger y su conjugada

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{x}, t) = \frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)\right)\psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (8)$$

tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -i \left[\psi^* \frac{1}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi - \psi \frac{1}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^* \right] \quad (9)$$

$$= -i \left[-\psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi + \cancel{\psi^* \frac{1}{\hbar} V \psi} + \psi \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^* - \cancel{\psi \frac{1}{\hbar} V \psi^*} \right] \quad (10)$$

$$= -i \left[-\psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi + \psi \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^* \right]. \quad (11)$$

Podemos llevar esta ecuación a la forma (6) usando que $\nabla^2 f = \nabla \cdot (\nabla f)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -i \left[-\psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \cancel{\nabla \psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi} + \cancel{\nabla \psi \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi^*} + \psi \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^* \right] \quad (12)$$

donde sumamos y restamos el mismo término para entonces extraer la divergencia

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot i \left[-\psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi + \psi \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi^* \right] \quad (13)$$

$$= -\nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (14)$$

Tenemos entonces que la corriente de probabilidad \mathbf{J} viene dada por

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = i \left[\psi \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi^* - \psi^* \frac{\hbar}{2m} \nabla \psi \right]. \quad (15)$$

Notemos que la ley de conservación local implica la conservación global. Esto se puede ver integrando en volumen la ecuación (6)

$$\int_V d^3 \mathbf{x} \frac{\partial}{\partial t} \rho = \int_V d^3 \mathbf{x} (-\nabla \cdot \mathbf{J}) \quad (16)$$

y usando el teorema de Stokes tenemos

$$\frac{d}{dt} P(V, t) = - \int_{\partial V} \mathbf{J} \cdot d^2 \mathbf{x}, \quad (17)$$

Tomando el límite en que el volumen V tiende a ser todo \mathbb{R}^3 , el borde ∂V se hallará infinitamente lejos del origen y como la función de onda es de cuadrado integrable, tiende a 0 en el infinito y por lo tanto \mathbf{J} también tiende a 0 allí. Concluimos entonces que en este límite la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{d}{dt} P(\mathbb{R}^3, t) = 0, \quad (18)$$

es decir, la probabilidad sobre todo el espacio no cambia en el tiempo. Así, si nuestra función de onda satisface (2) a $t = 0$ lo hará para todo tiempo posterior al evolucionarla según la ecuación de Schrödinger.

Tratemos ahora de interpretar mejor la corriente de probabilidad \mathbf{J} . Para eso recordemos que el valor medio del momento sobre todo el espacio viene dado por

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi d^3 \mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi d^3 \mathbf{x}. \quad (19)$$

Esta magnitud debe ser real ya que corresponde a los valores observados en el laboratorio y lo es ya que

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi d^3 \mathbf{x} \right)^* = \int_{\mathbb{R}^3} \psi (i\hbar \nabla) \psi^* d^3 \mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi d^3 \mathbf{x}, \quad (20)$$

donde en el último paso integramos por partes y usamos que los términos de borde se anulan en el infinito. Sin embargo, el valor medio del momento en una región $V \subseteq \mathbb{R}^3$ NO puede ser

$$\int_V \psi^* \mathbf{p} \psi d^3 \mathbf{x} \quad (21)$$

ya que esta no es una magnitud real. Para solucionar esto podemos notar que

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \text{Re} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi d^3 \mathbf{x} \right) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{x} \text{Re} (\psi^* (-i\hbar \nabla) \psi). \quad (22)$$

Así, podemos decir que la densidad de valor medio del momento viene dado por $\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \text{Re} (\psi^* (-i\hbar \nabla) \psi)$, que ahora sí será por definición una función real. Pero notemos que la corriente de probabilidad \mathbf{J} se puede expresar como

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 2 \frac{1}{2m} \text{Re} (\psi^* (-i\hbar \nabla) \psi) = \frac{\mathbf{p}(\mathbf{x})}{m} = \mathbf{v}(\mathbf{x}). \quad (23)$$

Vemos entonces que la corriente de probabilidad, que escrita en términos de la función de onda parece un objeto bastante oscuro, puede ser interpretado como la densidad de valor medio de la velocidad. Es decir, la ecuación de continuidad nos dice que la densidad de probabilidad en un punto cambia debido a que (en valor medio) la partícula se mueve.