Mecánica Cuántica

Grupo 8269 – Sem. 2026–1

Marcos López Merino *Prof.: Dr. Ángel Sánchez Cecilio*

Tarea 3

Entrega: 15 de septiembre de 2025

Problema 8 **(10 pts)**

En clase vimos que al cuantificar el cambio en el tiempo de la energía cinética, teníamos

$$\frac{\mathrm{d}E_{\text{pot}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\int \mathrm{d}^3x\, \dot{\psi}^*(\nabla^2\psi) + (\nabla^2\psi^*)\dot{\psi}\right]. \tag{8.1}$$

El problema consiste en que muestren el cambio en el tiempo de la ecuación anterior se puede escribir como

$$\frac{\mathrm{d}E_{\text{pot}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}^3x\, \psi^*\nabla^2\psi\right].$$

Solución

Para saber como debemos proceder, desarrollamos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\nabla^2\psi) &= \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla^2\psi + \psi^*\frac{\partial\nabla^2\psi}{\partial t},\\ &= \dot{\psi}^*\nabla^2\psi + \psi^*\nabla^2\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right),\\ &= \dot{\psi}^*\nabla^2\psi + \psi^*\nabla^2\dot{\psi}. \end{aligned}\tag{8.2}$$

Comparando las Ecuaciones (8.1) y (8.2) identificamos que debemos probar que

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^3r\, \nabla^2(\psi^*)\dot{\psi} &= \int \mathrm{d}^3r\, \nabla\cdot\nabla\psi^*\dot{\psi},\\ &= \int \mathrm{d}^3r\, \nabla\cdot(\nabla\psi^*\psi).\end{aligned}\tag{8.3}$$

Si desarrollamos la Ecuación (8.3) notaremos que hay un término extra que no está en nuestra expresión original, veámoslo por componentes, i.e.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\frac{\mathrm{d}\psi^*\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\Big)\dot{\psi} + \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}, \\
\nabla\cdot\Big[(\nabla\psi^*)\dot{\psi}\Big] &= \nabla\cdot[\nabla\psi^*]\dot{\psi} + (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi}), \\
\Rightarrow \nabla\cdot(\nabla\psi^*)\dot{\psi} &= \nabla\cdot\Big[(\nabla\psi^*)\dot{\psi}\Big] - (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi})
\end{aligned}$$

Sustituyendo en la Ecuación (8.3),

$$\int \mathrm{d}^3r\ \nabla\cdot(\nabla\psi^*)\dot{\psi} = \int \mathrm{d}^3r\ \nabla\cdot\Big[(\nabla\psi^*)\dot{\psi}\Big] - \int \mathrm{d}^3r\ (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi}).$$

Por el teorema de la divergencia podemos escribir la primera integral como una integral de superficie, i.e.

$$\int \mathrm{d}^3r\ (\nabla^2\psi^*)\dot{\psi} = \int_{\partial V} \mathrm{d}\vec{S}\ \cdot\nabla(\psi^*)\dot{\psi} - \int \mathrm{d}^3r\ (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi}). \tag{8.4}$$

Sin embargo la primera integral es cero, ya que sabemos que estamos integrando sobre todo el espacio, por lo que la frontera de este “volumen” está en infinito, pero no hay función de onda ahí. La expresión anterior se reduce a

$$\int \mathrm{d}^3r\ (\nabla^2\psi^*)\dot{\psi} = -\int \mathrm{d}^3r\ (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi}). \tag{8.5}$$

Ya estamos más cerca de mostrar lo que deseábamos, haciendo el razonamiento análogo para el integrando de la Ecuación (8.5), i.e. lo escribimos como una divergencia estudiándolo por componentes.

$$\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i} = \frac{\mathrm{d}\Big(\psi^*\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big)}{\mathrm{d}x_i}$$

pero

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\psi^*\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big) &= \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i} + \psi^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big), \\
\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\psi^*\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big) - \psi^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\Big(\frac{\mathrm{d}\dot{\psi}}{\mathrm{d}x_i}\Big), \\
(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\dot{\psi}) &= \nabla\cdot(\psi^*\nabla\dot{\psi}) - \psi^*\nabla^2\dot{\psi}.
\end{aligned}$$

Sustituendo en la Ecuación (8.5),

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^3r\ (\nabla^2\psi^*)\dot{\psi} &= -\int \mathrm{d}^3r\ \nabla\cdot(\psi^*\nabla\dot{\psi}) + \int \mathrm{d}^3r\ \psi^*\nabla^2\dot{\psi}, \\
&= -\int \mathrm{d}\vec{S}\ \cdot(\psi^*\nabla\dot{\psi}) + \int \mathrm{d}^3r\ \psi^*\nabla^2\dot{\psi}.
\end{aligned}$$

Por el mismo argumento que se usó para pasar de la Ecuación (8.4) a la Ecuación (8.5), la primeral integral desaparece, i.e. es igual a cero.

$$\boxed{\int \mathrm{d}^3 r\, (\nabla^2 \psi^*)\dot{\psi} = \int \mathrm{d}^3 r\, \psi^* \nabla^2 \dot{\psi}.}$$

Sustituyendo la Ecuación (8.2) en la Ecuación (8.1),

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{pot}}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \mathrm{d}^3 r\, \left[\dot{\psi}^* \nabla^2 \psi + \psi^* \nabla^2 \dot{\psi}\right], \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \int \mathrm{d}^3 r\, \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \nabla^2 \psi), \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int \mathrm{d}^3 r\, \psi^* \nabla^2 \psi.
\end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}E^{\mathrm{pot}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\hbar^2}{2m} \int \mathrm{d}^3 r\, \psi^* \nabla^2 \psi\right].}$$

Problema 9 (20 pts)

En clase vimos que en la mecánica cuántica, cuando trabajamos con un paquete de onda que describe una partícula libre de masa m, existe una ecuación de continuidad de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

donde

$$\begin{aligned}\rho &= \psi^* \psi, \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi}\Big[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi\Big].\end{aligned}$$

La cual físicamente nos indica que los cambios temporales en la densidad de probabilidad ρ se relacionan a divergencias en la densidad de corriente de probabilidad $\vec{j}$.

La pregunta es: ¿cómo se modifica esta ecuación de continuidad si la partícula tiene carga q, masa m, y se encuentra en presencia de un campo electromagnético?

Solución

La ecuación de Schrödinger para una partícula con carga q, masa m y que es encuentra en presencia de un campo electromagnético es:

$$i\hbar\dot{\psi} = \frac{1}{2m}\left[\underbrace{\left(\tfrac{\hbar}{i}\nabla - \tfrac{q}{c}\vec{A}\right)^2}_{(A)} + q\phi\right]\psi. \tag{9.1}$$

Desarrollamos (A) de la expresión anterior,

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{q}{c}\vec{A}\right) &= -\hbar^2\nabla\cdot\nabla - \frac{\hbar q}{ic}\nabla\cdot\vec{A} - \frac{\hbar q}{ic}\vec{A}\cdot\nabla + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}\cdot\vec{A}, \\ &= -\hbar^2\nabla^2 - \frac{\hbar q}{ic}(\nabla\cdot\vec{A} - \vec{A}\cdot\nabla) + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|^2.\end{aligned}$$

Sustituyendo en la Ecuación (9.1) y desarrollando,

$$i\hbar\dot{\psi} = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2\psi - \frac{\hbar q}{ic}\underbrace{\left((\nabla\cdot\vec{A})\psi - \vec{A}\cdot\nabla\cdot\psi\right)}_{(B)} + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|\psi + q\phi\psi\right].$$

Notemos que podemos escribir (B) como $\nabla \cdot (\vec{A}\psi)$,

$$i\hbar\dot{\psi} = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2\psi - \frac{\hbar q}{ic}\nabla \cdot (\vec{A}\psi) + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|\psi + q\phi\psi\right]. \tag{9.2}$$

Calculamos el conjugado de la Ecuación (9.2),

$$-i\hbar\dot{\psi}^* = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2\psi^* + \frac{\hbar q}{ic}\nabla \cdot (\vec{A}\psi^*) + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|^2\psi^* + q\phi\psi^*\right]. \tag{9.3}$$

Ahora, multiplicamos la Ecuación (9.2) por ψ^*,

$$i\hbar\psi^*\dot{\psi} = \frac{1}{2m}\left[-h^2\psi^*\nabla^2\psi - \frac{\hbar q}{ic}\psi^*\nabla \cdot (\vec{A}\psi) + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|^2\psi^*\psi + q\phi\psi^*\psi\right]. \tag{9.4}$$

Y, la Ecuación (9.3) por ψ,

$$-i\hbar\dot{\psi}^*\psi = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2(\nabla^2\psi^*)\psi + \frac{\hbar q}{ic}\nabla \cdot (\vec{A}\psi^*)\psi + \frac{q^2}{c^2}|\vec{A}|\psi^*\psi + q\phi\psi^*\psi\right]. \tag{9.5}$$

Restando la Ecuación (9.5) de la Ecuación (9.4),

$$i\hbar(\psi^*\psi + \dot{\psi}^*\psi) = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\underbrace{\left(\psi^*\nabla^2\psi - (\nabla^2\psi^*)\psi\right)}_{(C)} - \frac{\hbar q}{ic}\left(\psi^*\nabla \cdot (\vec{A}\psi) + (\nabla \cdot (\vec{A}\psi^*))\psi\right)\right].$$

Por el problema anterior sabemos que podemos escribir (C) como divergencias, el primer término como

$$\nabla \cdot (\psi^*\nabla\psi) = (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi) + \psi^*\nabla^2\psi,$$
$$\psi^*\nabla^2\psi = \nabla \cdot (\psi^*\nabla\psi) - (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi).$$

y el segundo,

$$\nabla \cdot (\nabla\psi^*)\psi = (\nabla^2\psi^*)\psi + (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi),$$
$$(\nabla^2\psi^*)\psi = \nabla \cdot (\nabla\psi^*)\psi - (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi).$$

Entonces,

$$i\hbar(\psi^*\psi + \dot{\psi}^*\psi) = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\left(\nabla \cdot (\psi^*\nabla\psi) - \nabla \cdot ((\nabla\psi^*)\psi)\right) - \frac{\hbar q}{ic}\underbrace{\left(\psi^*(\nabla \cdot (\vec{A}\psi)) + (\nabla \cdot (\vec{A}\psi^*))\psi\right)}_{(D)}\right]$$

Desarrollando (D) por componentes:

$$\psi^*\frac{\mathrm{d}(A_i\psi)}{\mathrm{d}x_i} + \frac{\mathrm{d}(A_i\psi^*)}{\mathrm{d}x_i}\psi = \psi^*\left[\frac{\mathrm{d}A_i}{\mathrm{d}x_i}\psi + A_i\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x_i}\right] + \left[\frac{\mathrm{d}A_i}{\mathrm{d}x_i}\psi^* + A_i\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x_i}\right]\psi,$$

$$
\begin{aligned}
&= (\nabla \cdot \vec{A})\psi^*\psi + \psi^*\vec{A} \cdot \nabla\psi + (\nabla \cdot \vec{A})\psi^*\psi + \vec{A} \cdot (\nabla\psi^*\psi), \\
&= 2(\nabla \cdot \vec{A})\psi^*\psi + \nabla \cdot (\vec{A}\psi^*\psi).
\end{aligned}
$$

Eligiendo $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, tenemos que:

$$
\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi) + \frac{q}{2mci}\vec{A}\psi^*\psi\right],
$$

donde

$$
\boxed{
\begin{aligned}
&\rho = \psi^*\psi, \\
&\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi) + \frac{q}{2mci}\vec{A}\psi^*\psi.
\end{aligned}
}
$$

Por lo tanto, la ecuación de continuidad para una partícula de carga q, masa m y que se encuentra en presencia de un campo electromagnético es

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