12: O espectro contínuo

A equação de Schrödinger de um sistema físico de hamiltoniano $\hat{H}$ é

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Suponhamos que ψ seja um estado estacionário, ou seja, que

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Inserindo-se esta expressão na equação de Schrödinger , obtém-se uma equação para $\psi(\vec{r})$, que é

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad , \tag{191}$$

conhecida como equação de Schrödinger *independente do tempo*. Resolvê-la é determinar o par $(\psi(\vec{r}),E)$, onde E é um número.

Para exemplificar, vamos tratar um caso muto simples: uma partícula livre, de massa m, que se move ao longo do eixo x. Neste caso

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

e a Eq.(191) é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad . \tag{192}$$

Introduzindo

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

podemos reescrever a equação acima assim:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad , \tag{193}$$

cuja solução geral é

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{194}$$

com A e B arbitrários. Existe solução para todo k, e, como

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ,$$

existe solução para todo $E \geq 0$. Diz-se então que o espectro é contínuo.

Seja $\hat{O}$ um operador associado a uma quantidade física de espectro contínuo. Escreveremos a equação de autovalores assim:

$$\hat{O}\psi_f = O_f \psi_f \tag{195}$$

onde o índice f agora varia continuamente. Como veremos mais tarde, as autofunções associadas a um espectro contínuo não são normalizáveis, isto é, não é possível impor para elas a condição

$$\int |\psi_f|^2 dq = 1$$

Exemplo: a função de onda de um estado estacionário de uma partícula livre, cuja parte espacial vimos na Eq.(194), é

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{196}$$

onde usamos $\omega = \frac{E}{\hbar}$. Então

$$|\psi(x,t)|^2 = |A|^2$$

e, por isso,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty \quad !$$

A seguir vamos descobrir uma maneira de normalizar adequadamente as autofunções ligadas a um espectro contínuo.

Seja ψ uma função de onda normalizável. A expansão dela em autofunções da quantidade física $\hat{O}$, cujo espectro é contínuo, é

$$\psi = \int df a_f \psi_f \tag{197}$$

Queremos que $|a_f|^2 df$ seja a probabilidade de que, efetuada uma medida de $\hat{O}$, o valor obtido esteja entre f e $f + df$. Logo, $\int |a_f|^2 df = 1$. Da mesma forma, $\int dq |\psi(q)|^2 = 1$. Segue que

$$\int a_f^* a_f df = \int \psi^* \psi dq \tag{198}$$

e, como

$$\psi^* = \int df a_f^* \psi_f^* \quad , \tag{199}$$

também que

$$\int a_f^* a_f df = \int \left(\int df a_f^* \psi_f^* \right) \psi dq = \int df a_f^* \int dq \psi_f^* \psi \tag{200}$$

Comparando o primeiro termo com o último, temos

$$a_f = \int dq \psi_f^* \psi \quad (Fourier) \tag{201}$$

que permite calcular os coeficientes da expansão $\psi = \int df a_f \psi_f$.

Reescrevendo a expansão acima como $\psi = \int df' a'_f \psi_f$ e usando-a na Eq.(656), temos

$$a_f = \int dq \psi_f^* \int df_{\prime} a_{f'} \psi_{f'} = \int df' a_{f'} \int dq \psi_f^* \psi_{f'} \tag{202}$$

Mas

$$a_f = \int df' a_{f'} \delta(f - f') \tag{203}$$

Comparando as duas últimas, obtém-se

$$\int dq \psi_f^* \psi_{f'} = \delta(f - f') \tag{204}$$

que é a relação de ortogonalidade para autofunções do espectro contínuo. Consequentemente, as relações básicas para o espectro contínuo são:

$$\psi = \int df a_f \psi_f \tag{205}$$

$$\int \psi^* \psi dq = \int df |a_f|^2 \tag{206}$$

$$a_f = \int dq \psi_f^* \psi \tag{207}$$

$$\int \psi_f^* \psi_{f'} dq = \delta(f - f') \tag{208}$$