Autoestados da energia cinética

A energia cinética de uma partícula de massa m, em mecânica quântica, é dada pelo quadrado do operador momentum dividido pelo dobro da massa:

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}. \qquad (1)$$

O operador hamiltoniano, gerador da evolução temporal de uma partícula livre, é dado pelo operador energia cinética da partícula, isto é, pela Eq. (1). Os autoestados da energia cinética, como é fácil verificar usando a Eq. (1), são os mesmos autoestados do operador momentum. Esses autoestados não são normalizáveis, pois são dados por ondas planas:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} \right). \qquad (2)$$

O produto escalar entre dois autoestados de energia cinética é proporcional à função delta de Dirac tridimensional, cujo argumento é a diferença entre os dois vetores momenta. Se esses vetores forem distintos, os correspondentes autoestados serão ortogonais, mas, se forem idênticos, seu produto escalar divergirá. Nesta postagem, com vistas a aplicações à teoria formal de espalhamento, vou definir uma nova amplitude para as ondas planas, diferente da usual (cf. Eq. (2)), para que seus produtos escalares sejam ainda proporcionais à função delta de Dirac tridimensional, mas agora com a diferença entre as energias como um dos argumentos, além dos argumentos angulares.

Queremos, portanto, encontrar autofunções da energia cinética, $|\Phi_{\hat{\mathbf{p}}}(E)\rangle$, com autovalores E, tais que

$$\langle \Phi_{\hat{\mathbf{p}}'}(E') | \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}(E) \rangle = \delta(E' - E)\, \delta^{(2)}(\hat{\mathbf{p}}' - \hat{\mathbf{p}}), \qquad (3)$$

onde, dados versores

$$\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{x}} \operatorname{sen}\theta_{\hat{\mathbf{p}}'} \cos\varphi_{\hat{\mathbf{p}}'} + \hat{\mathbf{y}} \operatorname{sen}\theta_{\hat{\mathbf{p}}'} \operatorname{sen}\varphi_{\hat{\mathbf{p}}'} + \hat{\mathbf{z}} \cos\theta_{\hat{\mathbf{p}}'} \qquad (4)$$

e

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{x}} \operatorname{sen}\theta_{\hat{\mathbf{p}}} \cos\varphi_{\hat{\mathbf{p}}} + \hat{\mathbf{y}} \operatorname{sen}\theta_{\hat{\mathbf{p}}} \operatorname{sen}\varphi_{\hat{\mathbf{p}}} + \hat{\mathbf{z}} \cos\theta_{\hat{\mathbf{p}}}, \qquad (5)$$

definimos:

$$\delta^{(2)}(\hat{\mathbf{p}}' - \hat{\mathbf{p}}) \equiv \frac{1}{\operatorname{sen}\theta_{\hat{\mathbf{p}}}} \delta(\theta_{\hat{\mathbf{p}}'} - \theta_{\hat{\mathbf{p}}})\, \delta(\varphi_{\hat{\mathbf{p}}'} - \varphi_{\hat{\mathbf{p}}}). \qquad (6)$$

Na Eq. (3),

$$E' = \frac{p'^2}{2m} \qquad (7)$$

e

$$E = \frac{p^2}{2m}. \qquad (8)$$

Mas,

$$\begin{aligned} \delta\left(E' - E\right) &= \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) \\ &= 2m\delta\left(p'^2 - p^2\right) = \frac{m}{p}\delta\left(p' - p\right). \qquad (9) \end{aligned}$$

A substituição da Eq. (9) de volta na Eq. (3) fornece

$$\left\langle \Phi_{\hat{\mathbf{p}}'}\left(E'\right) \middle| \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}\left(E\right)\right\rangle = \frac{m}{p}\delta\left(p' - p\right)\delta^{(2)}\left(\hat{\mathbf{p}}' - \hat{\mathbf{p}}\right). \qquad (10)$$

Porque, em coordenadas esféricas,

$$\delta^{(3)}\left(\mathbf{p}' - \mathbf{p}\right) = \frac{1}{p^2}\delta\left(p' - p\right)\delta^{(2)}\left(\hat{\mathbf{p}}' - \hat{\mathbf{p}}\right), \qquad (11)$$

vemos que a Eq. (10) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \left\langle \Phi_{\hat{\mathbf{p}}'}\left(E'\right) \middle| \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}\left(E\right)\right\rangle &= \frac{mp}{p^2}\delta\left(p' - p\right)\delta^{(2)}\left(\hat{\mathbf{p}}' - \hat{\mathbf{p}}\right) \\ &= mp\delta^{(3)}\left(\mathbf{p}' - \mathbf{p}\right). \qquad (12) \end{aligned}$$

Sabendo que, em virtude da Eq. (2),

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{p}' \middle| \mathbf{p}\right\rangle &= \int_{V_r^\infty} d^3r \, \left\langle \mathbf{p}' \middle| \mathbf{r}\right\rangle \left\langle \mathbf{r} \middle| \mathbf{p}\right\rangle \\ &= \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int_{V_r^\infty} d^3r \, \exp\left[i\frac{\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}'\right)\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right], \end{aligned}$$

isto é,

$$\left\langle \mathbf{p}' \middle| \mathbf{p}\right\rangle = \delta^{(3)}\left(\mathbf{p}' - \mathbf{p}\right), \qquad (13)$$

podemos definir

$$\left\langle \mathbf{r} \middle| \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}\left(E\right)\right\rangle \equiv \sqrt{mp}\left\langle \mathbf{r} \middle| \mathbf{p}\right\rangle, \qquad (14)$$

ou seja,

$$\left| \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}\left(E\right)\right\rangle \equiv \sqrt{mp}\left| \mathbf{p}\right\rangle. \qquad (15)$$

Usando a Eq. (2), podemos escrever a Eq. (14) explicitamente assim:

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Phi_{\hat{\mathbf{p}}}\left(E\right)\right\rangle &\equiv \frac{\sqrt{mp}}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right) \\ &= \frac{m^{3/4}E^{1/4}}{2^{5/4}\left(\pi\hbar\right)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r}\right). \qquad (16) \end{aligned}$$