Sistemas coordenados y Separación de variables

Introducción. Electrodinámica y Mecánica Cuántica

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$$
$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$
$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$
$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

En ausencia de fuentes

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0; \quad \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Recuerde que $\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$

De modo tal que $\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\cancel{\nabla \cdot \vec{E}}^{\,0}) - \nabla^2 \vec{E}$

$$= -\nabla^2 \vec{E}$$

$$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}} \quad \text{Ecuación de onda}$$

Buscamos escribir a la ec. de onda de modo tal que $\vec{E} \to f = f(x;t)$.

$\nabla \times \vec{E} = 0 \Rightarrow \vec{E} = -\nabla\phi$, ϕ: potencial electrostático (función escalar)

$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \qquad \nabla \cdot (-\nabla\phi) = 0$

$$\left(\hat{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right) \cdot \left(\hat{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)\Phi = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\Phi\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial y}\Phi\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi\right) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\Phi + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 \Phi = 0} \quad \text{Ecuación de Laplace}$$

Ecuación de onda $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_i,t) = H\Psi(\vec{r}_i,t)}$, $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(x)$ con $\Psi(\vec{r}_i,t)$ estacionaria $\Psi(\vec{r}_i,t) = e^{-i\omega t}\Phi(\vec{r})$. Así pues

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x); \qquad \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_i,t) = \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-i\omega t}\Phi(\vec{r})\right) = -i\omega e^{-i\omega t}\Phi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow i\hbar\left(-i\omega e^{-i\omega t}\Phi(\vec{r})\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)$$

$$\Rightarrow \hbar\omega\Phi(\vec{r}) = H\Phi(\vec{r})$$

pero $\hbar\omega \to E$, entonces $\boxed{H\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})}$ la cual es la ecuación de eigenvalores. Los problemas que sabemos resolver son

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & \text{átomo de H} \\ \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 & \text{oscilador armónico} \end{cases}$$

Sistemas coordenados

Cartesinas → Cilíndricas

$\rho^2 = x^2 + y^2$

$\theta = \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right)$

$z = z$

Cilíndricas → Cartesianas

$x = \rho\cos\theta$

$y = \rho\sin\theta$

$z = z$

Cartesianas → Esféricas

Esféricas → Cartesianas

$x = r\sin\theta\cos\varphi$

$y = r\sin\theta\sin\varphi$

$z = r\cos\theta$

Coord. generalizadas

$q_i = q_i(x_j) \Leftrightarrow x_j = x_j(q_1, \dots, q_N)$, tal que $1 \leq i \leq N$ y $1 \leq j \leq N$. Por ejemplo:

$$q_1 = q_1(x_1, x_2, x_3)$$
$$q_2 = q_2(x_1, x_2, x_3)$$
$$q_3 = q_3(x_1, x_2, x_3)$$

Así se tiene que,

$$dx = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial x}{\partial q_i} dq_i$$

$$dx^2 = dx \cdot dx = \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial x}{\partial q_i} dq_i\right)\left(\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial x}{\partial q_j} dq_j\right)$$

para el cartesianas tendremos

$$ds^2 = g_{11}\, dq_1^2 + g_{22}\, dq_2^2 + g_{33}\, dq_3^2$$

Definimos $ds^2 = \sum_{ij} g_{ij}\, dq_i\, dq_j$ donde $g_{ij} = \frac{\partial x}{\partial q_i}\frac{\partial x}{\partial q_j} + \frac{\partial y}{\partial q_i}\frac{\partial y}{\partial q_j} + \frac{\partial z}{\partial q_i}\frac{\partial z}{\partial q_j}$ y además $g_{ij} = 0 \Leftrightarrow i \neq j$.

Para los sistemas ortogonales tenemos $g_{ii} = h_i^2$, llamamos a h_i factores de escala. Mas aún,

$$ds^2 = \sum_{ij} g_{ij}\, dq_i\, dq_j = \sum_i g_{ii}\, dq_i^2 = \sum_i h_i^2\, dq_i^2$$

Por lo tanto, $\boxed{d\vec{r} = \sum_i \hat{e}_i h_i dq_i}$. Además, $g_{ii} = \left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2$ y también $\hat{e}_i = \frac{1}{h_i}\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}$, entonces

$$\boxed{\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} = h_i\, \hat{e}_i}$$

Ejemplo: ¿h_r, h_θ, h_φ?

$$h_r = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial r}\right)^2} \qquad \hat{r} = \frac{1}{h_r}\frac{\partial \vec{r}}{\partial r}$$