Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική ΙΙ *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις ΙΙ: Αλλαγή Συστήματος Συντεταγμένων

Στις σημειώσεις αυτές δίνομε την αναπαράσταση των τελεστών $\vec{\nabla}$ και $\vec{\nabla}^2$ σε ένα καμπυλόγραμμο σύστημα συντεταγμένων. Εξετάζονται οι περιπτώσεις πολικών συντεταγμένων, σφαιρικών συντεταγμένων και κυλινδρικών συντεταγμένων

1. Ο Γενικός μετασχηματισμός

Για να μελετήσουμε (σε ένα μετρικό χώρο) τη μετάβαση από ένα καρτεσιανό σε ένα καμπυλόγραμμο σύστημα συντεταγμένων ξεκινάμε από μια ποσότητα η οποία δεν αλλάζει αν αλλάξουμε το σύστημα συντεταγμένων: το μήκος του στοιχειώδους ανύσματος ds^2. Σε καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων το μήκος αυτό καθορίζεται από το Πυθαγόρειο Θεώρημα :

$$ds^2 = (dx_1)^2 + (dx_2)^2 + (dx_3)^2 + \dots \tag{2.1}$$

Στη σχέση αυτή χρησιμοποιήσαμε τον (πολύ βολικό) συμβολισμό

$$x \equiv x_1 \ , \ y \equiv x_2 \ , \ z \equiv x_3 \ , \dots$$

ενώ τα αποσιωπητικά δηλώνουν ότι δεν δουλεύουμε κατ' ανάγκη στις 3 διαστάσεις. Έστω τώρα ότι κάνουμε την αλλαγή

$$x_1 = x_1(q_1, q_2, q_3, \dots) \ , \ x_2 = x_2(q_1, q_2, q_3, \dots) \ , \dots \tag{2.2}$$

που σημαίνει ότι τα στοιχειώδη μήκη στην (1) μπορούν να γραφούν

$$dx_j = \sum_i \left(\frac{\partial x_j}{\partial q_i} \right) dq_i \ , \ j = 1, 2, 3, \dots \tag{2.3}$$

Βέβαια, θεωρούμε ότι η αλλαγή (2.2) είναι αντιστρεπτή, δηλ. Ότι μπορούμε να γράψουμε:

$$q_1 = q_1(x_1, x_2, x_3, \dots) \ , \ q_2 = q_2(x_1, x_2, x_3, \dots) \ , \dots \tag{2.4}$$

και επομένως

$$dq_j = \sum_i \left(\frac{\partial q_j}{\partial x_i} \right) dx_i \ , \ j = 1, 2, 3, \dots \tag{2.5}$$

Αντικαθιστώντας τη σχ. (2.3) στη σχ. (2.1) παίρνομε

$$ds^2 = \sum_k dx_k dx_k = \sum_{i,j} \left(\sum_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j} \right) dq_i dq_j \equiv \sum_{i,j} g_{ij}(q) dq_i dq_j \tag{2.6}$$

Η ποσότητα

$$g_{ij}(q) \equiv \sum_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j} = g_{ji}(q) \tag{2.7}$$

λέγεται **μετρικός τανυστής** και παίζει ρόλο κλειδί στη μετάβαση από ένα σύστημα συντεταγμένων σε άλλο.

Σε ότι ακολουθεί θα θεωρούμε τον μετρικό τανυστή διαγώνιο: $g_{ij}(q) = 0$ όταν $i \neq j$. Αυτό, όπως θα διαπιστώσουμε, σημαίνει ότι θα θεωρούμε το νέο σύστημα ορθογώνιο όπως και το καρτεσιανό. Με άλλα λόγια θα θεωρούμε ότι οι οικογένειες επιφανειών $q_i(x_1, x_2, x_3, \dots) = c_i ; \ i = 1, 2, 3, \dots$ (όπου c_i σταθερές) τέμνονται κάθετα μεταξύ τους. Ο περιορισμός αυτός, με τη βοήθεια της σχ. (2.7) μεταφράζεται στην

$$g_{ij}(q) = h_i^2(q)\delta_{ij} \quad \text{όπου} \quad h_i^2(q) = g_{ii}(q) = \sum_k \left(\frac{\partial x_k}{\partial q_i} \right)^2 \tag{2.8}$$

Μετά από τη σχέση αυτή το στοιχειώδες μήκος (2.6) γράφεται :

$$ds^2 = \sum_i h_i^2 dq_i dq_i = (h_1 dq_1)^2 + (h_2 dq_2)^2 + ... \tag{2.9}$$

Στο αποτέλεσμα αυτό μπορούμε να διαβάσουμε πολλά πράγματα. Το πρώτο είναι ότι οι συνιστώσες του στοιχειώδους ανύσματος $d\vec{s}$ έχουν μέγεθος :

$$ds_i = h_i(q) dq_i \quad i = 1, 2, ... \tag{2.10}$$

γεγονός που μας επιτρέπει να ονομάσουμε τις συναρτήσεις h_i **παράγοντες βάθμισης.** Το δεύτερο είναι ότι και στο νέο σύστημα συντεταγμένων μετράμε αποστάσεις όπως και στο καρτεσιανό: μέσω το Πυθαγορείου θεωρήματος. Αυτή η διαπίστωση δεν είναι παρά ένας άλλος τρόπος να πούμε ότι και το νέο σύστημα είναι ένα ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων.

Μετά την παραπάνω ανάλυση είναι λογικό να εισάγουμε μια ορθοκανονική βάση ανυσμάτων του νέου συστήματος

$$\hat{e}_i(q) \cdot \hat{e}_j(q) = \delta_{ij} \quad , \quad i, j = 1, 2, 3, ... \tag{2.11}$$

μέσω των οποίων να γράψουμε

$$d\vec{s} = (h_1 dq_1)\hat{e}_1 + (h_2 dq_2)\hat{e}_2 + ... = \sum_i (h_i dq_i)\hat{e}_i \tag{2.12}$$

έτσι ώστε η σχέση (2.9) να προκύπτει ως άμεση (και προφανής) συνέπεια. Έχει ιδιαίτερο πρακτικό ενδιαφέρον να βρούμε τη σχέση ανάμεσα στη βάση (2.11) και στην αντίστοιχη βάση του καρτεσιανού συστήματος : $\hat{x}_i \cdot \hat{x}_j = \delta_{ij}$.

Η σχέση αυτή μπορεί να βρεθεί αν συγκρίνουμε την αναπαράσταση του στοιχειώδους ανύσματος $d\vec{s}$ στα δύο συστήματα συντεταγμένων :

$$d\vec{s} = dx_1 \hat{x}_1 + dx_2 \hat{x}_2 + ... = h_1 dq_1 \hat{e}_1 + h_2 dq_2 \hat{e}_2 + ... \tag{2.13}$$

Παίρνοντας τα εσωτερικά γινόμενα με $\hat{x}_k$ και $\hat{e}_i$ παίρνομε:

$$\begin{aligned} \hat{x}_k \cdot d\vec{s} = dx_k = h_1 dq_1 \hat{e}_1 \cdot \hat{x}_k + h_2 dq_2 \hat{e}_2 \cdot \hat{x}_k + ... = \sum_i h_i dq_i \hat{e}_i \cdot \hat{x}_k \\ \hat{e}_i \cdot d\vec{s} = h_i dq_i = dx_1 \hat{x}_1 \cdot \hat{e}_i + dx_2 \hat{x}_2 \cdot \hat{e}_i + ... = \sum_k dx_k \hat{x}_k \cdot \hat{e}_i \end{aligned} \tag{2.14}$$

Συνδυάζοντας τις παραπάνω σχέσεις με τις (2.3) και (2.5) θα δούμε ότι

$$\begin{aligned} dx_k = \sum_i h_i dq_i \hat{e}_i \cdot \hat{x}_k = \sum_i \frac{\partial x_k}{\partial q_i} dq_i \quad \Rightarrow \quad \hat{e}_i(q) \cdot \hat{x}_k \equiv \gamma_{ik}(q) = \frac{1}{h_i(q)} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \\ h_i dq_i = \sum_k dx_k \hat{x}_k \cdot \hat{e}_i = h_i \sum_k \frac{\partial q_i}{\partial x_k} dx_k \quad \Rightarrow \quad \hat{e}_i(q) \cdot \hat{x}_k \equiv \gamma_{ik}(q) = h_i(q) \frac{\partial q_i}{\partial x_k} \end{aligned} \tag{2.15}$$

Οι ποσότητες $\hat{e}_i(q) \cdot \hat{x}_k \equiv \gamma_{ik}(q)$ λέγονται (για ευνόητους λόγους) **συνημίτονα κατεύθυνσης** και συνδέουν τις δύο βάσεις μεταξύ τους:

$$\hat{e}_i(q) = \sum_j \gamma_{ij}(q) \hat{x}_j, \qquad \hat{x}_j = \sum_i \gamma_{ij}(q) \hat{e}_j(q) \tag{2.16}$$

• Ένα πρώτο συμπέρασμα που θα μας είναι χρήσιμο είναι τα στοιχείο όγκου στα δύο συστήματα συντεταγμένων. Όπως μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε θα είναι :

$$dV = d^D s = ds_1 ds_2 ds_3 ... = dx_1 dx_2 dx_3 ... = h_1 dq_1 h_2 dq_2 h_3 dq_3 ... \tag{2.17}$$

Στο ίδιο αποτέλεσμα μπορούμε να καταλήξουμε και μέσω της σχέσης :

$$dx_1 dx_2 dx_3 ... = \frac{\partial(x_1, x_2, x_3, ...)}{\partial(q_1, q_2, q_3, ...)} dq_1 dq_2 dq_3 ... \tag{2.18}$$

Το σύμβολο $\frac{\partial(x_1, x_2, x_3, ...)}{\partial(q_1, q_2, q_3, ...)}$ (**Jacobian**) στην προηγούμενη σχέση είναι η ορίζουσα :

$$\frac{\partial(x_1, x_2, x_3, ...)}{\partial(q_1, q_2, q_3, ...)} \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \frac{\partial x_1}{\partial q_2} & \frac{\partial x_1}{\partial q_3} & ... \\ \frac{\partial x_2}{\partial q_1} & \frac{\partial x_2}{\partial q_2} & \frac{\partial x_2}{\partial q_3} & ... \\ ... & & & \end{vmatrix} \tag{2.19}$$

• Από τις σχέσεις στις οποίες έχουμε καταλήξει μπορούμε να βρούμε τώρα την κλίση (grad) μιας (βαθμωτής) συνάρτησης :

$$\vec{\nabla} f = \sum_i \hat{x}_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_i \hat{x}_i (\sum_k \frac{\partial q_k}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial q_k}) = \sum_i \hat{x}_i (\sum_k \gamma_{ki} \frac{\partial f}{h_k \partial q_k}) = \sum_k (\sum_i \gamma_{ki} \hat{x}_i) \frac{\partial f}{h_k \partial q_k}$$

και επομένως

$$\vec{\nabla} f = \sum_k \hat{e}_k(q) \frac{1}{h_k(q)} \frac{\partial}{\partial q_k} f \tag{2.20}$$

• Η Laplacian βρίσκεται αμέσως από την τελευταία σχέση :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2 &= \sum_i \hat{e}_i(q) \frac{1}{h_i(q)} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sum_j \hat{e}_j(q) \frac{1}{h_j(q)} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) = \\ &= \sum_i \frac{1}{h_i(q)} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{1}{h_i(q)} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) + \sum_{i,j} \hat{e}_i(q) \frac{\partial \hat{e}_j(q)}{\partial q_i} \frac{1}{h_i(q) h_j(q)} \frac{\partial}{\partial q_j} \end{aligned} \tag{2.21}$$

(Για το τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ορθογωνιότητα (2.11) των $\hat{e}_i$)

2. <u>Πολικές συντεταγμένες</u>

Σαν ένα πρώτο παράδειγμα θα εφαρμόσουμε τα παραπάνω συμπεράσματα για την περίπτωση **πολικών συντεταγμένων**

$$x = r\cos\varphi \ , \ y = r\sin\varphi \tag{2.22}$$

Εδώ είμαστε σε δύο διαστάσεις και για να βρούμε την αντιστοιχία με τον προηγούμενο συμβολισμό θά γράψουμε $q_1 \equiv r$, $q_2 \equiv \varphi$. Οι ποσότητες που μας χρειάζονται μπορούν να βρεθούν αμέσως :

$$h_1^2 = h_r^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2 = 1 \quad , \quad h_2^2 = h_\varphi^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi}\right)^2 = r^2$$

$$\hat{e}_1 = \hat{e}_r = \frac{1}{h_r}\left(\frac{\partial x}{\partial r}\hat{x} + \frac{\partial y}{\partial r}\hat{y}\right) = \cos\varphi\hat{x} + \sin\varphi\hat{y} = \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\hat{e}_2 = \hat{e}_\varphi = \frac{1}{h_\varphi}\left(\frac{\partial x}{\partial \varphi}\hat{x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi}\hat{y}\right) = -\sin\varphi\hat{x} + \cos\varphi\hat{y} \tag{2.23}$$

$$\gamma_{11} = \cos\varphi \;\; , \;\; \gamma_{12} = \sin\varphi \;\; , \;\; \gamma_{21} = -\sin\varphi \;\; , \;\; \gamma_{22} = \cos\varphi$$

Επομένως :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \gamma_{11}\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \gamma_{21}\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} - \sin\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2.24}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \gamma_{12}\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \gamma_{22}\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2.25}$$

$$\vec{\nabla} = \hat{e}_r\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\varphi\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \hat{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2.26}$$

Για την Laplacian αυτό που χρειάζεται να παρατηρήσουμε είναι ότι

$$\hat{e}_i\frac{\partial}{\partial q_i}\hat{e}_i = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial q_i}\hat{e}_i\cdot\hat{e}_i = 0 \qquad \text{και ότι} \qquad \frac{\partial \hat{e}_1}{\partial \varphi} = \hat{e}_2 \;\; , \;\; \frac{\partial \hat{e}_2}{\partial r} = -\hat{e}_1 \tag{2.27}$$

και έτσι

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{2.28}$$

Το αντίστοιχο παράδειγμα στις 3 διαστάσεις αφορά στις **σφαιρικές συντεταγμένες** :

$$x = r\cos\varphi\sin\theta \;\; , \;\; y = r\sin\varphi\sin\theta \;\; , \;\; z = r\cos\theta \tag{2.29}$$

(εδώ $q_1 = r,\; q_2 = \theta,\; q_3 = \varphi$)

Εύκολα μπορούμε να βρούμε ότι :

$$h_r^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial r}\right)^2 = 1 \;\; , \;\; h_\theta^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \theta}\right)^2 = r^2$$

$$h_\varphi^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \varphi}\right)^2 = r^2\sin^2\theta$$

$$\hat{e}_r = \frac{1}{h_r}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial x_i}{\partial r}\hat{x}_i = \cos\varphi\sin\theta\hat{x} + \sin\varphi\cos\theta\hat{y} + \cos\theta\hat{z} = \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\hat{e}_\theta = \frac{1}{h_\theta}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial x_i}{\partial \theta}\hat{x}_i = \cos\varphi\cos\theta\hat{x} + \sin\varphi\cos\theta\hat{y} - \sin\theta\hat{z} \tag{2.30}$$

$$\hat{e}_\varphi = \frac{1}{h_\varphi}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial x_i}{\partial \varphi}\hat{x}_i = -\sin\varphi\hat{x} + \cos\varphi\hat{y}$$

$$\gamma_{11} = \cos\varphi\sin\theta \ , \ \gamma_{12} = \sin\varphi\sin\theta \ , \ \gamma_{13} = \cos\theta$$

$$\gamma_{21} = \cos\varphi\cos\theta \ , \ \gamma_{22} = \sin\varphi\cos\theta \ , \ \gamma_{23} = -\sin\theta$$

$$\gamma_{31} = -\sin\varphi \ , \ \gamma_{32} = \cos\varphi \ , \ \gamma_{33} = 0$$

Κι έτσι :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sum_{i=1}^{3}\gamma_{i1}\frac{1}{h_i}\frac{\partial}{\partial q_i} = \cos\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \cos\varphi\cos\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sum_{i=1}^{3}\gamma_{i2}\frac{1}{h_i}\frac{\partial}{\partial q_i} = \sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \sin\varphi\cos\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2.31}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \sum_{i=1}^{3}\gamma_{i3}\frac{1}{h_i}\frac{\partial}{\partial q_i} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \sin\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

Η κλίση έχει τη μορφή

$$\vec{\nabla} = \hat{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2.32}$$

Για να βρούμε τη Laplacian θα παρατηρήσουμε πρώτα ότι

$$\frac{\partial\hat{e}_r}{\partial\theta} = \hat{e}_\theta \ , \ \frac{\partial\hat{e}_r}{\partial\varphi} = 0 \ , \ \frac{\partial\hat{e}_\theta}{\partial\varphi} = \cos\theta\hat{e}_\varphi \ , \ \frac{\partial\hat{e}_\varphi}{\partial\theta} = 0$$

και θα εφαρμόσουμε τη γενική έκφραση για να πάρουμε:

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{2.33}$$

3. Κυλινδρικές συντεταγμένες

Δίδονται από τις σχέσεις

$$x = r\cos\varphi \ , \ y = r\sin\varphi \ , \ z = z$$

είναι προφανώς ισοδύναμο με ένα διδιάστατο σύστημα πολικών συντεταγμένων το οποίο μπορεί να κινηθεί στον άξονα z .

Η περιγραφή, επομένως , μπορεί να διαβαστεί από τα αποτελέσματα που ήδη βρήκαμε:

$$h_1^2 = h_r^2 = 1 \ , \ h_2^2 = h_\varphi^2 = r^2 \ , \ h_3^2 = h_z^2 = 1$$

$$\hat{e}_1 = \hat{e}_r = \frac{1}{h_r}\left(\frac{\partial x}{\partial r}\hat{x} + \frac{\partial y}{\partial r}\hat{y}\right) = \cos\varphi\hat{x} + \sin\varphi\hat{y} = \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\hat{e}_2 = \hat{e}_\varphi = \frac{1}{h_\varphi}\left(\frac{\partial x}{\partial\varphi}\hat{x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\hat{y}\right) = -\sin\varphi\hat{x} + \cos\varphi\hat{y}$$

$$\hat{e}_3 = \hat{e}_z = \hat{z}$$

$$\gamma_{11} = \cos\varphi \ , \ \gamma_{12} = \sin\varphi \ , \ \gamma_{21} = -\sin\varphi \ , \ \gamma_{22} = \cos\varphi$$

$$\gamma_{13} = \gamma_{23} = 0 \ , \ \gamma_{13} = \gamma_{23} = 0 \ , \ \gamma_{33} = 1$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \gamma_{11}\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \gamma_{21}\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} - \sin\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \gamma_{12}\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \gamma_{22}\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2.34}$$

$$\vec{\nabla} = \hat{e}_r\frac{1}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\varphi\frac{1}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \hat{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

4. <u>Τελεστές της στροφορμής</u>

Γυρνάμε τώρα στην αναπαράσταση των τελεστών $\hat{L}_i$, $\hat{\vec{L}}^2$ και $\hat{L}_\pm$ στον χώρο των θέσεων σε καρτεσιανές και σφαιρικές συντεταγμένες.
Μετά από τα προηγούμενα αποτελέσματα είναι εύκολο να δούμε ότι:

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_x \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_y \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.35}$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_z \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

και

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_+ \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_x + i\hat{L}_y \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \hbar\left[z(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}) - (x+iy)\frac{\partial}{\partial z} \right]\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_- \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_x - i\hat{L}_y \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -\hbar\left[z(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}) - (x-iy)\frac{\partial}{\partial z} \right]\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.36}$$

Αν χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις (2.31) θα βρούμε :

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_x \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_y \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_z \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.37}$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_+ \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar e^{i\varphi}(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\left\langle \vec{r} \,\middle|\, \hat{L}_- \,\middle|\, \vec{r}' \right\rangle = -i\hbar e^{-i\varphi}(-i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

Στις παραπάνω σχέσεις τη συνάρτηση δ θα πρέπει να τη διαβάζουμε σε σφαιρικές συντεταγμένες :

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi') \tag{2.38}$$

Η σχέση αυτή μπορεί να παραχθεί από τις ιδιότητες της συνάρτησης δ αλλά και από τον ορισμό της. Πράγματι. σε καρτεσιανές συντεταγμένες θα έχουμε

$$\int d^D r f(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r}') = f(\vec{r}')\,.$$

Αν πάμε σε ένα καμπυλόγραμμο (ορθογώνιο) σύστημα η παραπάνω σχέση θα πάρει τη μορφή

$$\int d^D q\left(h_1...h_D\right) f(\vec{q})\delta(\vec{q},\vec{q}') = f(\vec{q}')$$

όπου με $\delta(\vec{q},\vec{q}')$ σημειώσαμε την αναζητούμενη έκφραση της συνάρτησης δ. Το συμπέρασμα τώρα είναι άμεσο:

$$\delta(\vec{q},\vec{q}') = \frac{1}{h_1...h_D}\delta(q_1-q_1')...\delta(q_D-q_D') = \frac{1}{h_1...h_D}\delta(\vec{q}-\vec{q}') \tag{2.39}$$

Μπορούμε επίσης να βρούμε από τις σχ.(2.37)

$$\langle \vec{r}\,|\,\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2\,|\vec{r}'\rangle = \langle \vec{r}\,|\,\hat{\vec{L}}^2\,|\vec{r}'\rangle = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.40}$$

και ο τελεστής κινητικής ενέργειας θα είναι :

$$\langle \vec{r}\,|\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}|\vec{r}'\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}L^2\right)\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.41}$$

όπου γράψαμε

$$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{2.42}$$

5. <u>Σημείωση</u>

Η σχέση (2.41) μπορεί να γραφεί και με τη μορφή

$$\langle \vec{r}\,|\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}|\vec{r}'\rangle = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2+\frac{1}{r^2}L^2\right)\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{2.43}$$

όπου

$$\hat{p}_r \equiv -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{2.44}$$

ο λεγόμενος τελεστής της **ακτινικής ορμής .** Το αποτέλεσμα (2.43) μπορούμε να το ελέγξουμε αμέσως από το εξής:

$$(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})f = (\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})(f'+\frac{f}{r}) = f''+\frac{2f'}{r} \tag{2.45}$$

Την ονομασία του τελεστή την καταλάβενομε αν πάμε στη σχέση

$$m\frac{d}{dt}\langle r\rangle = \frac{mi}{\hbar}\langle\left[H,r\right]\rangle \underset{o\rho\sigma}{=} \langle p_r\rangle \tag{2.46}$$

Αμέσως βλέπομε ότι

$$\langle p_r\rangle = \frac{mi}{\hbar}\left\langle\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}),r\right]\right\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\left\langle\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2},r\right]+\left[\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r},r\right]\right\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\left\langle 2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\right\rangle$$

και έτσι

$$\langle p_r\rangle = \left\langle -i\hbar(\frac{\partial}{\partial r}+r)\right\rangle \tag{2.47}$$