Mecânica Analítica

Capítulo 7: Transformações Canónicas

H. Terças

Instituto Superior Técnico
(Departamento de Física)

7.1 Transformações canónicas

- Como vimos, a formulação **Hamiltoniana** não oferece especiais vantagens na resolução de problemas mecânicos (com excepção no caso de variáveis cíclicas).

- Contudo, fornece uma compreensão mais profunda da estrutura da mecânica, e veremos que está na base de boa parte da Física Moderna.

- Além disso, dá-nos pistas de como elevar o nível de abstracção da formulação da mecânica.

  É explorando a possibilidade de abstrairmos a formulação da mecânica que surgem as **transformações canónicas**, que muitas vezes permitem a simplificação dos problemas.

Um exemplo das vantagens na transformação de coordenadas está patente no problema do potencial central

$$L(x, y, \dot{x}, \dot{y}) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(\sqrt{x^2 + y^2}).$$

Neste caso, nenhuma das coordenadas (x, y) é cíclica. Como vimos, existem vantagens na formulação do problema em coordenadas polares (r, θ)

$$L(r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2\right) - V(r).$$

Neste sistema de coordenadas, $p_\theta = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$ é conservado em virtude de θ ser uma coordenada cíclica.

$\therefore$ A transformação $(x, y) \to (r, \theta)$ simplificou o problema!

Nos capítulos §1 e §2, vimos que o Lagrangeano era invariante para **transformações pontuais** do tipo

$$Q_i = Q_i(q_i, t).$$

Na formulação Hamiltoniana, os q_i's e p_i's são independentes.[1] Assim, pretendemos transformações do tipo

$$\begin{cases} Q_i = Q_i(q_i, p_i, t), \\ \\ P_i = P_i(q_i, p_i, t) \end{cases}$$

Por razões óbvias, a única requisição que fazemos à partida é que as transformações seja invertíveis.

$\therefore$ A ideia é construir um novo "Hamiltoniano" $K(Q_i, P_i, t)$.

[1] Recorde-se de que a transformação de Legendre elimina a dependência funcional nos $\dot{q}_i$'s.

As transformações de interesse são aquelas que produzem variáveis **canonicamente conjugadas**,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}.$$

Como vimos no capítulo §6, a condição de variável canónica é equivalente a satisfazer o princípio de Hamilton

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \Big(P_i \dot{Q}_i - K(Q_i, P_i, t) \Big)\, dt = 0.$$

Em termos das variáveis "antigas" (q_i, p_i)

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t))\, dt = 0.$$

A validade simultânea entre as duas equações implica[2]

$$\lambda(p_i \dot{q}_i - H) = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt}$$

[2] Atente que o último termo, dF/dt, resulta da invariância do Lagrangeano para derivadas totais.

$$\lambda(p_i\dot{q}_i - H) = P_i\dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt}. \qquad (1)$$

A constante λ é um **factor de escala** que pode ser introduzido para generalizar a relação de transformação[3].

Aqui, estaremos interessados na família de transformações com $\lambda = 1$ (que recebem o nome de **transformações canónicas restritas**).

$\therefore$ A função F surge como uma **função geradora** da transformação canónica.

[3]Ver Goldstein §9.1 para uma discussão acerca das implicações de $\lambda \neq 1$.

- Consideremos o caso $F = F_1(q_i, Q_i, t)$. A relação de transformação descrita na Eq. (1) vem

$$\begin{aligned} p_i\dot{q}_i - H &= P_i\dot{Q}_i - K + \frac{dF_1}{dt} \\ &= P_i\dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \end{aligned}$$

Como as variáveis q_i e Q_i são independentes, a igualdade mantém-se se os coeficientes de $\dot{q}_i$ e $\dot{Q}_i$ se anularem

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_1}{\partial q_i} \\[2ex] P_i = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q_i} \end{cases},$$

fornecendo, adicionalmente, a relação entre H e K,

$$K(Q_i, P_i, t) = H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial}{\partial t}F(q_i, Q_i, t).$$

TÉCNICO LISBOA

Pode acontecer que a transformação $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$ não seja viável através de uma função geradora do tipo $F = F_1(q_i, Q_i, t)$.[4] Nesse caso, podemos optar por definir

$$F = F_2(q_i, P_i, t) - Q_i P_i.$$

Substituindo na Eq. (1), temos

$$p_i \dot{q}_i - H = -Q_i \dot{P}_i - K + \frac{dF_2}{dt}.$$

Repetindo o procedimento, resultaria nas seguintes equações canónicas

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ \\ Q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i} \end{cases},$$

e, finalmente

$$K(Q_i, P_i, t) = H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial}{\partial t} F_2(q_i, P_i, t).$$

[4] Exemplo: pense no caso em que p_i não pode ser escrito em termos de q_i, Q_i...

As trasformações canónicas mais usuais são efectuadas recorrendo às quatro funções geradoras listadas abaixo:

$$F = F_1(q_i, Q_i, t), \qquad F = F_2(q, P, t) - Q_i P_i$$

$$F = F_3(q_i, Q_i, t) + q_i p_i, \qquad F = F_4(p_i, P_i, t) + q_i p_i - Q_i P_i.$$

$F_1(q_i, Q_i, t)$	$F_2(q_i, P_i, t)$	$F_3(p_i, Q_i, t)$	$F_4(p_i, P_i, t)$
$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}$	$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}$	$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}$	$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}$
$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$	$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}$	$P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i}$	$Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}$
$K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$	$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}$	$K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}$	$K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}$
$\frac{\partial p_i}{\partial Q_i} = -\frac{\partial P_i}{\partial q_i}$	$\frac{\partial p_i}{\partial P_i} = \frac{\partial Q_i}{\partial q_i}$	$\frac{\partial q_i}{\partial Q_i} = \frac{\partial P_i}{\partial p_i}$	$\frac{\partial Q_i}{\partial p_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial P_i}$

Table: Relações de transformação para os quatro tipo de funções F_k.

TÉCNICO LISBOA

- Exemplo 1: Consideremos uma transformação trivial do tipo $F_2 = F_2(q_i, P_i, t)$, dada por

$$F_2 = q_i P_i.$$

As relações de transformação são, portanto

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i \\ \\ Q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i \end{cases},$$

e a relação trivial $H = K$. Como podemos observar, esta forma particular de F_2 corresponde à **transformação identidade**

$$\begin{bmatrix} P_i \\ Q_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_i \\ q_i \end{bmatrix}.$$

- Exemplo 2: Consideremos uma transformação trivial do tipo $F_3 = F_3(p_i, Q_i, t)$, dada por

$$F_3 = p_i Q_i.$$

As relações de transformação são, portanto

$$\begin{cases} P_i = -\dfrac{\partial F_3}{\partial Q_i} = -p_i \\ \\ q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial Q_i} = -Q_i \end{cases},$$

e a relação trivial $H = K$. Como podemos observar, esta forma particular de F_3 corresponde à **transformação identidade** com sinal negativo

$$\begin{bmatrix} P_i \\ Q_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_i \\ q_i \end{bmatrix}.$$

- Exemplo 3: Consideremos uma transformação do tipo $F_1 = F_1(q_i, Q_i, t)$, dada por

$$F_1 = q_i Q_i.$$

Usando a Tabela (1)

$$\left\{ \begin{array}{r} p_i = \dfrac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i \\[2em] P_i = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i \end{array} \right. ,$$

e a relação $H = K$. Esta forma particular de F_1 corresponde à **transformação simplética**

$$\left[\begin{array}{c} Q_i \\ P_i \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} q_i \\ p_i \end{array} \right].$$

Vejamos como aplicar este formalismo a sistemas físicos que conhecemos.

- O Hamiltoniano do oscilador harmónico é

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2m}\left(p^2 + m^2\omega_0^2 q^2\right).$$

A soma de dois quadrados sugere uma transformação onde H seja, ele próprio, uma coordenada cíclica nas novas coordenadas. Se procurarmos transformações do tipo

$$p = f(P)\cos Q, \quad q = \alpha f(P)\sin Q,$$

vemos que, para $\alpha = 1/m\omega_0$, o novo Hamiltoniano seria[5]

$$K(Q,P) = \frac{f^2(P)}{2m}\left(\cos^2 Q + \sin^2 Q\right) = \frac{f^2(P)}{2m},$$

onde $Q \propto H$ é uma coordenada cíclica.

$\therefore$ Resta determinar $f(P)$ que resulte numa **transformação canónica**.

[5] Até aqui, trata-se de uma transformação genérica (não necessariamente canónica).

Usando uma função geradora do tipo $F = F_1(q, Q)$,

$$F_1 = \frac{1}{2} m\omega_0 q^2 \cot Q,$$

as equações de transformação resultam

$$\begin{cases} p = \dfrac{\partial F_1}{\partial q} = m\omega_0 \cot Q \\[2ex] P = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q} = \dfrac{m\omega_0 q^2}{2\sin^2 Q} \end{cases}$$

Invertendo,

$$q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega_0}} \sin Q, \quad p = \sqrt{2pm\omega_0} \cos Q.$$

Usando a definição, obtemos imediatamente

$$f(P) = \sqrt{2m\omega_0 P}.$$

O Hamiltoniano neste sistema de coordenadas é, simplesmente $K = \omega_0 P$. Como $K \neq K(Q)$, o momento conjugado é constante,

$$P = \frac{E}{\omega}.$$

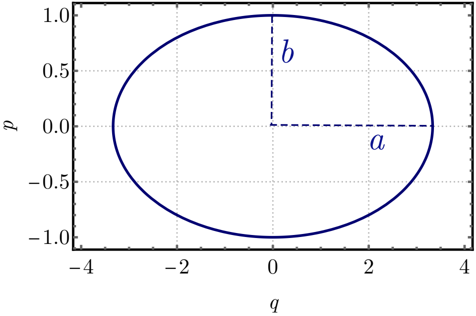
A equação para Q vem, então

$$Q = \frac{\partial K}{\partial P} = \omega_0 \quad \Longrightarrow Q = \omega_0 t + \delta.$$

Invertendo a transformação, temos imediatamente a solução do movimento nas coordenadas originais

$$\begin{cases} q = \sqrt{\dfrac{2E}{m\omega_0^2}} \sin\left(\omega_0 t + \delta\right) \\ \\ p = \sqrt{2mE} \cos\left(\omega_0 t + \delta\right) \end{cases} .$$

No **espaço de fases**, o movimento define uma elipse de semi-eixo maior $a = \sqrt{2E/m\omega_0^2}$ e semi-eixo menor $b = \sqrt{2mE}$.



A área da elipse é conservada, $A = \pi ab = 2\pi E/\omega_0$.

Podemos sistematizar as transformações canónicas optando pela sua **representação simplética**. Voltemos à transformação genérica do tipo

$$Q_i = Q_i(q_i, p_i, t), \quad P_i = P_i(q_i, p_i, t).$$

Para uma transformação independente do tempo, o Hamiltoniano não se altera. Calculando a derivada total (soma no índice j!)

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial Q_i}{\partial p_i}\dot{p}_i = \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}.$$

Por outro lado,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i} = \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial P_i} + \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial P_i}.$$

A transformação é canónica sse

$$\boxed{\left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\right)_{p,q} = \left(\frac{\partial p_j}{\partial P_i}\right)_{Q,P}} \quad \boxed{\left(\frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\right)_{p,q} = -\left(\frac{\partial q_j}{\partial P_i}\right)_{Q,P}}$$

Repetindo para $\dot{P}_i$, forneceria duas "relações de Maxwell" adicionais

$$\boxed{\left(\frac{\partial P_i}{\partial q_j}\right)_{q,p} = -\left(\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}\right)_{q,p}} \qquad \boxed{\left(\frac{\partial P_i}{\partial p_j}\right)_{q,p} = -\left(\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}\right)_{Q,P}}$$

Em termos do vector $\vec{\eta} = (q_i, ..., q_n; p_1, ..., p_n)^T$, como vimos

$$\dot{\vec{\eta}} = \mathbf{J}\frac{\partial H}{\partial \vec{\eta}}, \quad \mathbf{J} = \left[\begin{array}{cc} 0 & \mathbb{I}_{n\times n} \\ -\mathbb{I}_{n\times n} & 0 \end{array}\right]$$

A transformação de coordenadas pode ser representada na forma $\vec{\zeta} = \vec{\zeta}(\vec{\eta})$ (em componentes, $\zeta_i = \zeta_i(\eta_i)$), de forma a que

$$\dot{\zeta}_i = \underbrace{\frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j}}_{M_{ij}} \dot{\eta}_j \qquad \left(\dot{\vec{\zeta}} = \mathbf{M}\dot{\vec{\eta}}\right),$$

e, portanto (soma nos índices repetidos, j e em k)

$$\dot{\zeta}_i = M_{ij} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \eta_k} \qquad \left(\dot{\vec{\zeta}} = \ \mathbf{MJ}\frac{\partial H}{\partial \vec{\eta}}\right)$$

Fazendo uso da transformação transposta

$$\frac{\partial H}{\partial \eta_k} = \frac{\partial H}{\partial \zeta_\ell}\frac{\partial \zeta_\ell}{\partial \eta_k} = M_{\ell k}\frac{\partial H}{\partial \zeta_\ell} = M^T_{k\ell}\frac{\partial H}{\partial \zeta_\ell},$$

$$\dot{\zeta}_i = M_{ij}J_{jk}M^T_{k\ell}\frac{\partial H}{\partial \eta_\ell} \qquad \left(\dot{\vec{\zeta}} = \mathbf{MJM}^T\frac{\partial H}{\partial \vec{\zeta}}\right).$$

Se a transformação for canónica, por hipótese temos $\dot{\vec{\zeta}} = \mathbf{J}\frac{\partial H}{\partial \vec{\zeta}}$,

$$\mathbf{MJM}^T = \mathbf{J},$$

o que equivale a $\mathbf{MJ} = \mathbf{J}\left(\mathbf{M}^T\right)^{-1}$. Como $\mathbf{J}^T\mathbf{J} = -\mathbb{I}$, temos ainda $\mathbf{JM} = \left(\mathbf{M}^T\right)^{-1}$, conduzindo à **condição simplética**

$$\boxed{\mathbf{M}^T\mathbf{JM} = \mathbf{J} \Leftrightarrow \mathbf{MJM}^T = \mathbf{J}}$$

7.2 Parêntesis de Poisson

Sejam $u = u(q_i, p_i)$ e $v = v(q_i, p_i)$ duas funções. Define-se o **parêntesis de Poisson** como

$$[u, v]_{p,q} = \frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i}.$$

Podemos escrever esta operação na forma simplética,

$$[u, v]_{\vec{\eta}} = \left(\frac{\partial u}{\partial \vec{\eta}}\right)^T \mathbf{J}\frac{\partial v}{\partial \vec{\eta}}.$$

Podemos imediatamente verificar que[6]

$$[q_i, q_j]_{p,q} = [p_i, p_j]_{p,q} = 0, \quad [q_i, p_j]_{p,q} = \delta_{ij},$$

que também se pode escrever na forma matricial como

$$[\vec{\eta}, \vec{\eta}]_{\vec{\eta}} = \mathbf{J}$$

[6]Estas relações serão muito úteis em mecânica quântica!

Por outro lado, para as coordenadas transformadas $\vec{\zeta}$ temos

$$\left[\vec{\zeta},\vec{\zeta}\right]_{\vec{\eta}} = \left(\frac{\partial\vec{\zeta}}{\partial\vec{\eta}}\right)^T \mathbf{J}\frac{\partial\vec{\zeta}}{\partial\vec{\eta}} = \mathbf{M}^T\mathbf{J}\mathbf{M}.$$

Se a transformação for canónica, então, pela condição simplética

$$\left[\vec{\zeta},\vec{\zeta}\right]_{\vec{\eta}} = \mathbf{J}.$$

Finalmente, como por definição $\left[\vec{\zeta},\vec{\zeta}\right]_{\vec{\zeta}} = [\vec{\eta},\vec{\eta}]_{\vec{\eta}} = \mathbf{J}$, temos[7]

$$\boxed{\left[\vec{\zeta},\vec{\zeta}\right]_{\vec{\zeta}} = \left[\vec{\zeta},\vec{\zeta}\right]_{\vec{\eta}} = [\vec{\eta},\vec{\eta}]_{\vec{\zeta}} = [\vec{\eta},\vec{\eta}]_{\vec{\eta}} = \mathbf{J}}$$

$\therefore$ Os parêntesis de Poisson são invariantes sob transformações canónicas!

[7] Isto é válido para qualquer parêntesis de Poisson $[u,v]$.

Como exercício, podemos demonstrar as seguintes propriedades dos parêntesis de Poisson:

- $[u, u] = 0$,
- $[u, v] = -[v, u]$ **(anti-simetria)**
- a e b constantes, $[au + bv, w] = a[u, w] + b[v, w]$ **(linearidade)**
- $[uv, w] = [u, w]v + u[v, w]$ **(não-associatividade)**
- $[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0$ **(identidade de Jacobi)**

TÉCNICO LISBOA

Podemos agora aproveitar para usar os parêntesis de Poisson para demonstrar algo que há já algum tempo está debaixo dos nossos olhos...

Seja $u(q_i, p_i; t)$ uma função qualquer (pense na energia cinética, no momento angular, na posição do centro de massa...). Temos que

$$\dot{u} = \frac{\partial u}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial u}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial t}.$$

Por outras palavras,

$$\boxed{\frac{du}{dt} = [u, H] + \frac{\partial u}{\partial t}.}$$

Esta equação contém as equações de Hamilton[8] como um caso especial se fizermos $u = q_i$ ou $u = p_i$

$$\dot{p}_i = [p_i, H], \quad \dot{q}_i = [q_i, H]$$

[8] obviamente, não é? Tudo isto foi derivado a partir das eqs. de Hamilton...

Da definição, decorrem também relações interessantes que já conhecíamos

$$\dot{H} = \cancel{[H, H]} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t},$$

o que significa que H só não se conserva caso dependa explicitamente do tempo!

Se u for uma constante do movimento, então

$$\dot{u} = [u, H] + \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad \Leftrightarrow [H, u] = \frac{\partial u}{\partial t}.$$

Ainda mais interessante, se u e v forem duas constantes do movimento, então

$$[H, [u, v]] = 0,$$

significando que o parêntesis de Poisson de duas constantes gera uma nova constante do movimento **(teorema de Poisson)**[9].

[9] Especialmente importante para definir, no contexto do caos Hamiltoniano, a integrabilidade dos sistemas.

Este formalismo é especialmente útil para estudar transformações canónicas **infinitesimais**

$$Q_i = q_i + \delta q_i, \quad P_i = p_i + \delta p_i,$$

ou de forma vectorial, $\zeta_i = \eta_i + \delta\eta_i$[10]. Uma função geradora possível desta transformação seria

$$F_2(q_i, P_i, t) = q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i, t),$$

cujas relações de transformação implicam (ver Tabela 1)

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \epsilon \dfrac{\partial G}{\partial q_i} \\ \\ Q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \epsilon \dfrac{\partial G}{\partial P_i} \end{cases},$$

de onde retiramos $\delta p_i = -\epsilon \dfrac{\partial G}{\partial q_i}$ e $\delta q_i = \epsilon \dfrac{\partial G}{\partial P_i}$.

[10] ou $\vec{\zeta} = \vec{\eta} + \delta\vec{\eta}$

De forma matricial, podemos escrever as transformações infinitesimais como

$$\delta\eta_i = \epsilon J_{ij}\frac{\partial G}{\partial \eta_j} \qquad \left(\delta\vec{\eta} = \epsilon \mathbf{J}\frac{\partial G}{\partial \vec{\eta}}\right).$$

Usando a definição de parêntesis de Poisson, $[q_i, u] = \dfrac{\partial u}{\partial q_i}$ e $[p_i, u] = -\dfrac{\partial u}{\partial p_j}$, ou seja

$$[\vec{\eta}, u] = \mathbf{J}\frac{\partial u}{\partial \vec{\eta}},$$

podemos inferir que[11]

$$\boxed{\delta\vec{\eta} = \epsilon[\vec{\eta}, G].}$$

$\therefore$ Os parêntesis de Poisson geram transformações infinitesimais uma vez conhecida a função geradora!

[11]Substituindo u por G na relação anterior...

Para o caso de $\epsilon = dt$ e $G = H$, verificamos então

$$\delta\vec{\eta} = dt[\vec{\eta}, H] = \dot{\vec{\eta}}dt = d\vec{\eta}.$$

Isto demonstra que, sob a "acção" do Hamiltoniano, as coordenadas conjugadas q_i e p_i mudam de $q_i(t)$ e $p_i(t)$ para $q_i(t + dt)$ e $p_i(t + dt)$. Por outras palavras, o movimento de um sistema no intervalo dt pode ser descrito como uma transformação canónica infinitesimal onde H é a função geradora.

Como verão adiante, esta é a essência da mecânica quântica, onde a função de onda evolui sob a acção do Hamiltoniano (que depois será promovido a operador!)

7.3 Equações do movimento

Como acabámos de perceber, os parêntesis de Poisson com o Hamiltoniano levam a evoluções temporais infinitesimais,

$$\delta\vec{\eta} = dt[\vec{\eta}, H] = \dot{\vec{\eta}}dt = d\vec{\eta}.$$

Vamos tentar perceber como podemos construir a evolução temporal de uma grandeza física. Representemos uma transformação canónica infinitesimal na forma

$$Q_i = q_i + \delta q_i, \quad P_i = p_i + \delta p_i.$$

De forma compacta, definimos os pontos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ no espaço de fases na forma

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}(q_i, p_i), \quad \mathcal{B} = \mathcal{B}(q_i + \delta q_i, p_i + \delta p_i) = \mathcal{B}(Q_i, P_i).$$

Seja ∂u a **variação infinitesimal** de uma certa quantidade física $u = u(q_i, p_i)$

$$\partial u = u(\mathcal{B}) - u(\mathcal{A}).$$

Em termos do vector simplético $\vec{\eta} = (q_1, ..., q_n; p_i, ..., p_n)$ podemos escrever[12]

$$\partial u = u(\vec{\eta} + \delta\vec{\eta}) - u(\vec{\eta}) = \frac{\partial u}{\partial \vec{\eta}} \cdot \delta\vec{\eta} = \left(\frac{\partial u}{\partial \vec{\eta}}\right)^T \cdot \epsilon \mathbf{J} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{\eta}}.$$

Isto é equivalente a

$$\partial u = \epsilon[u, G].$$

Uma aplicação imediata desta relação óbvia (segue da definição) é

$$\partial\vec{\eta} = \epsilon[\vec{\eta}, G] = \delta\vec{\eta}.$$

[12]Nota: $\delta\vec{\eta} = \epsilon\mathbf{J} \cdot \partial\vec{\eta} G = \epsilon[\eta, G]$, onde G é a função geradora infinitesimal.

Para uma transformação canónica finita,

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t}.$$

Para uma transformação canónica infinitesimal, $F = \epsilon G$

$$K = H + \epsilon \frac{\partial G}{\partial t}.$$

A variação no Hamiltoniano antigo é, portanto[13]

$$\partial H = H(\mathcal{B}) - K(\mathcal{A}) = H(\mathcal{B}) - H(\mathcal{A}) - \epsilon \frac{\partial G}{\partial t} = \epsilon [H, G] - \epsilon \frac{\partial G}{\partial t}.$$

Da definição de parêntesis de Poisson,

$$\boxed{\partial H = -\epsilon \frac{dG}{dt}.}$$

[13]Nota: $K(\mathcal{B}) \neq H(\mathcal{B})$. A função H também muda sob a acção de uma transformação canónica.

$$\boxed{\partial H = -\epsilon \frac{dG}{dt}.}$$

$\therefore$ Se G for uma constante do movimento, então G gera transformações canónicas infinitesimais que deixam H constante!

> As constantes do movimento são funções geradoras de transformações canónicas infinitesimais que deixam o Hamiltoniano invariante.

Isto é mais um reflexo das simetrias contidas no formalismo Hamiltoniano (Simetria = Conservação)

- Exemplo: Rotações infinitesimais. Seja $\delta\theta$ um ângulo inifitesimal em torno do eixo zz:

$$\begin{cases} \delta x = -y\delta\theta, \\ \delta y = x\delta\theta, \\ \delta z = 0. \end{cases}$$

Como $\delta q_i = \underbrace{\delta\theta}_{\epsilon} \dfrac{\partial G}{\partial p_i}$, a função geradora da TCI é[14]

$$G = xp_y - yp_x = (\vec{r} \times \vec{p})_z = L_z.$$

De uma forma geral, podemos dizer que a função geradora de rotações infinitesimais é

$$\boxed{G = \vec{L} \cdot \hat{n}.}$$

[14] TCI: Transformação Canónica Infinitesimal.

Seja α um parâmetro do espaço de fases (não o tempo!). Então, podemos escrever a variação infinitesimal de uma quantidade física $u = u(q_i(\alpha), p_i(\alpha)) \equiv u(\alpha)$ na forma[15]

$$du = d\alpha[u, G].$$

Contudo, por definição,

$$u(\alpha) = u(0) + \alpha \left.\frac{du}{d\alpha}\right|_0 + \frac{\alpha^2}{2!} \left.\frac{d^2u}{d\alpha^2}\right|_0 + ...,$$

e usando o facto de que $\dfrac{du}{d\alpha} = [u, G]$, temos

$$\frac{d^2u}{d\alpha^2} = [[u, G], G].$$

Então,

$$u(\alpha) = u(0) + \alpha[u, G]_0 + \frac{\alpha^2}{2!}[[u, G], G]_0 + ...$$

[15]Nota: Aqui usamos du ao invés de ∂u para representar a variação porque só temos um parâmetro, α. Esta mudança de notação é inofensiva...

Podemos voltar ao nosso exemplo das rotações e ver como podemos construir rotações **finitas**.

Sejam X, Y coordenadas obtidas após uma rotação finita, a partir do ponto x, y. Usando a expansão anterior, $\dfrac{dX}{d\theta} = [X, L_z] = [X, xp_y - yp_x]$

$$[X, L_z]_0 = -y, \quad [[X, L_z], L_z]_0 = -x, \quad [[[X, L_z], L_z], L_z]_0 = y.$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} X &= x - y\theta - x\frac{\theta^2}{2} + y\frac{\theta^3}{3!} + x\frac{\theta^4}{4!} + \ldots \\ &= x\sum_{\ell=0}^{\infty}(-1)^\ell \frac{\theta^{2\ell}}{(2\ell)!} + y\sum_{\ell=0}^{\infty}(-1)^\ell \frac{\theta^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!}, \end{aligned}$$

$$\therefore \boxed{X = x\cos\theta - y\sin\theta}$$

Como vimos, H é a função geradora dos deslocamentos **infinitesimais no tempo**,

$$\frac{du}{dt} = [u, H] + \frac{\partial u}{\partial t}.$$

Consideremos os casos $\partial_t u = 0$. Daqui podemos então inferir que a **equação integral do movimento** pode ser determinada de forma perturbativa

$$\boxed{u(t) = u(0) + t[u, H]_0 + \frac{t^2}{2!}[[u, H], H]_0 + \frac{t^3}{3!}[[[u, H], H], H]_0 + \ldots}$$

- Exemplo: A queda livre

  Podemos utilizar o formalismo dos parêntesis de Poisson para determinar directamente a evolução temporal da coordenada $y(t)$[16]

$$H(y, p_y) = \frac{p_y^2}{2m} - mgy.$$

- $[y, H] = \dfrac{p_y}{m}$
- $[[y, H], H] = \dfrac{1}{m}[p_y, H] = g.$

  Como o último parêntesis de Poisson é constante, os de ordem superior são indenticamente nulos.

$$\therefore y(t) = y(0) + t[y, H]_0 + \frac{t^2}{2!}[[y, H], H]_0 = y(0) + \frac{p_{y0}}{m}t + \frac{1}{2}gt^2.$$

[16] Escolhendo o sentido positivo a “apontar para baixo”...

Como vimos, os parêntesis de Poisson expressam as simetrias contidas nas equações do movimento (simetria = conservação). Até que ponto

podemos explorar isso?

Sejam $u = u(q_i, p_i)$ e $v = v(q_i, p_i)$ duas funções de estado. Em termos dos vectores simpléticos $\vec{\eta} = (q_i, ..., q_n; p_q, ..., p_n)$ (em components, η_i), definamos novos vectores e tensores simétricos

$$u_i \equiv \frac{\partial u}{\partial \eta_i}, \quad v_i \equiv \frac{\partial v}{\partial \eta_i}, \quad u_{ij} \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial \eta_i \partial \eta_j}, \qquad v_{ij} \equiv \frac{\partial^2 v}{\partial \eta_i \partial \eta_j}.$$

Nesta notação, o parêntesis de Poisson é um escalar que pode ser construído por contracção de tensores e vectores, i.e.[17]

$$[u, v] = u_i J_{ij} v_j.$$

[17] Recorde-se: J_{ij} são os elementos da matrix $\mathbf{J} = \mathrm{antidiag}(\mathbb{I}, -\mathbb{I})$.

Assim, seguindo esta prescrição,

$$\begin{aligned}[u,[v,w]] &= u_i J_{ij}[v,w]_j = u_i J_{ij}(u_k J_{k\ell} w_\ell)_j \\ &= u_i J_{ij}\left(v_k J_{k\ell} w_{\ell j} + v_{kj} J_{k\ell} w_\ell\right).\end{aligned}$$

Aplicando permutações entre u, v e w e substituindo na identidade de Jacobi $[u,[v,w]] + [v,[w,u]] + [w,[u,v]] = 0$, obtemos a seguinte propriedade[18]

$$(J_{ij} + J_{ji}) J_{k\ell} u_i v_k w_{\ell j} = 0,$$

que é consequência de $J_{ij} = -J_{ji}$.

Se olharmos para os parêntesis de Poisson como uma espécie de produto não-associativo, então a identidade de Jacobi pode ser o equivalente à relação de associatividade no produto usual

$$a(bc) = (ab)c,$$

[18] Na verdade, obtemos mais 4 termos deste tipo...

Se olharmos para os parêntesis de Poisson como uma espécie de produto não-associativo, então a identidade de Jacobi pode ser o equivalente à relação de associatividade no produto usual

$$a(bc) = (ab)c.$$

A não-comutatividade patente na identidade de Jacobi pode ser escrita na forma

$$[u_i, u_j] = u_i u_j - u_j u_i = c_{ijk} u_k.$$

Define-se uma **Álgebra de Lie não-comutativa**

- c_{ijk} são os factores de estrutura do grupo (dependem da representação, i.e. dos u_i's[19])
- u_i são os elementos da álgebra de Lie
- $Q(\theta_i) = e^{\sum_i \theta_i u_i}$ são os elementos do **grupo de Lie**

[19] c_{ijk} são quase sempre zero. Uma excepção: o momento angular, $[L_i, L_j] = \epsilon_{ijk} L_k$

- Exemplo: grupo especial unitário

Escolhamos as **matrizes de Pauli** como elementos da álgebra de Lie

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

que satisfazem a $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ (factor de estrutura $c_{ijk} = 2i\epsilon_{ijk}$).

Os ângulos de Euler (θ, ϕ, ψ) são os parâmetros geradores das rotações. Por exemplo, para uma rotação no eixo yOz[20]

$$\mathbf{Q}(\theta) = e^{\sigma_y \theta} = \exp\left(\begin{bmatrix} 0 & -i\theta \\ i\theta & 0 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 1 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 1 \end{bmatrix},$$

ou seja,

$$\mathbf{Q}(\theta) = \mathbb{I} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\sigma_x \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad \det\left[\mathbf{Q}(\theta)\right] = 1$$

[20] recorde-se, o ângulo da nutação do pião...

- Exemplo: grupo especial unitário

$$\mathbf{Q}(\theta) = e^{\sigma_y \theta} = \exp\left(\begin{bmatrix} 0 & -i\theta \\ i\theta & 0 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} 1 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 1 \end{bmatrix},$$

ou seja,

$$\mathbf{Q}(\theta) = \mathbb{I}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\sigma_x \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad \det\left[\mathbf{Q}(\theta)\right] = 1$$

As matrizes $\mathbf{Q}(\theta)$ geram o **grupo especial unitário** a duas dimensões, SU(2).

$\therefore$ Os grupos de Lie cujos geradores das TCI's são constantes do movimento, designam os *grupos de simetria* do sistema. Um exemplo é o momento angular, que é conservado no problema do potencial central.[21]

[21] As matrizes $\mathbf{Q}(\theta)$ são uma representação do grupo SU(2).

7.4 Teorema de Liouville

Uma aplicação final das transformações canónicas e dos parêntesis de Poisson está na base de um teorema fundamental em física estatística.

Considere um sistema de N partículas, e definamos a densidade no espaço de fases

$$\rho(q_i, p_i, t) = \frac{dN}{d\Omega},$$

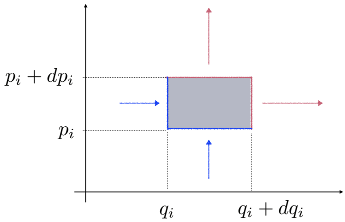
onde $d\Omega = \prod_{i=1}^{6N} dq_i dp_i$ é o elemento de volume no espaço de fases.

Consideremos a variação explícita no tempo do número de partículas num determinado ponto do espaço de fases[22]

$$\frac{\delta N(q_i, p_i, t)}{\delta t}$$

[22] Obviamente, $dN/dt = 0$ (conservação do número de partículas).

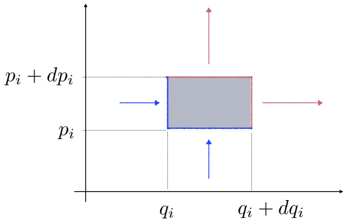
Consideremos um elemento de volume bi-dimensional $dq_i dp_i$ para um determinado grau de liberdade.



$$\frac{\partial N_{\text{dentro}}}{\partial t} = \rho \dot{p}_i dq_i + \rho \dot{q}_i dp_i = \rho \left(\dot{p}_i dq_i + \dot{q}_i dq_i \right)$$

$$\frac{\partial N_{\text{fora}}}{\partial t} = dq_i \left(\rho \dot{p}_i + \frac{\partial (\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} dp_i \right) + dp_i \left(\rho \dot{q}_i + \frac{\partial (\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} dq_i \right)$$

Consideremos um elemento de volume bi-dimensional $dq_i dp_i$ para um determinado grau de liberdade.



A variação é, portanto

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial N_{\text{dentro}}}{\partial t} - \frac{\partial N_{\text{fora}}}{\partial t}$$

$$= -\left[\frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i}\right]\underbrace{dq_i dp_i}_{d\Omega},$$

$$\therefore \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i}\right)$$

TÉCNICO LISBOA

Expandindo os termos, temos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underbrace{\rho \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right)}_{A} + \underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i}_{B} = 0.$$

Usando as equações de Hamilton, $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, vem

$$A = 0, \quad B = \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} = [\rho, H].$$

Teorema de Liouville

$$\dot{\rho} = [\rho, H] + \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\rho, H] + [H, \rho] = 0.$$

$\therefore$ A densidade de partículas no espaço de fases é conservada (fluido incompressível)