Mecánica Hamiltoniana

$\mathrm{M}_{\epsilon}\mathrm{CFunN}_{\epsilon}\mathrm{T}$

UPM

DFAII

ETSII, UPM

Resumen

Contenido

Página Inicial

◀◀ ▶▶

◀ ▶

Volver

Cerrar

Salir

Contenido

1. Introducción

En el siglo XIX, el irlandés William Rowan Hamilton, que había apreciado la potencia y elegancia con que Lagrange había dotado a la mecánica, emprende el trabajo de sistematización de la óptica, con objeto de someterla a un esquema parecido al de la mecánica. No sólo consiguió su objetivo, sino que además apreció que los sistemas ópticos y los sistemas mecánicos obedecen a un mismo principio variacional. La concepción sintética de Hamilton produjo una nueva visión de la mecánica, más *intrínseca* que la lagrangiana. La formulación hamiltoniana, desarrollada posteriormente por Jacobi, Poisson, etc, introdujo de nuevo una geometría en el espacio de fases de los sistemas mecánicos, en la que las normas euclídeas tradicionales de los espacios ordinarios se sustituyen por las formas simplécticas; los productos escalares, por los corchetes de Poisson, etc. Gracias al estudio de esta nueva geometría, científicos del siglo XX, como Poincaré y Burns lograron resolver problemas de mecánica celeste que habían permanecido sin resolver durante mucho tiempo.

La formulación hamiltoniana sirvió de base para el desarrollo de la mecánica cuántica a comienzos del siglo XX, principalmente en los modelos de De Broglie, Schrödinger, Heisenberg, etc. Aunque no pueden deducirse las leyes de la mecánica cuántica a partir de la formulación clásica hamiltoniana, el principio de correspondencia proporciona información muy valiosa para inferir el hamiltoniano cuántico a partir del clásico (en ambos casos el hamiltoniano determina la evolución del sistema).

2. Ecuaciones de Hamilton

En sistemas lagrangianos holónomos, es decir en aquellos sistemas holónomos posicionados por m coordenadas generalizadas independientes $q_1, \ldots, q_m$ en los que el movimiento viene determinado por las m ecuaciones

$$\frac{\mathrm{d}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}{\mathrm{d}t} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \qquad \forall i \in \{1, \ldots, m\}$$

es posbible reformular la dinámica de una manera más elegante.

La evolución de un sistema mecánico viene determinada, junto a las ecuaciones de Lagrange, por las condiciones iniciales $q_{10}, \ldots, q_{m0}, \dot{q}_{10}, \ldots, \dot{q}_{m0}$. El conjunto de los posibles valores de las $2m$-ernas constituye el *espacio de fases*. Estas $2m$ coordenadas evolucionan en el tiempo satisfaciendo las ecuaciones dinámicas correspondiente, trazando una familia de curvas que llenan el espacio de fases sin cortarse unas a otras (congruencia de curvas). En este espacio de fases se pueden utilizar diferentes sistemas de coordenadas. Si se elige el sistema de coordenadas $q_1, \ldots, q_m, p_1, \ldots, p_m$ donde

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{1}$$

entonces se llega a una formulación de la mecánica mucho más potente (en el sentido que luego se precisará) que la basada en las ecuaciones de Lagrange.

Sea la *función hamiltoniana* o *hamiltoniano*

$$H(q_1,\dots,q_m,p_1,\dots,p_m,t) = -L(q_1,\dots,q_m,\dot q_1,\dots,\dot q_m,t) + \sum_{i=1}^{m} p_i \dot q_i \quad (2)$$

donde en el segundo miembro las $\dot q_j$ son las funciones de $q_1,\dots,q_m,p_1,\dots,p_m,t$ obtenidas del sistema 1. A continuación se van a demostrar tres propiedades que relacionan la función lagrangiana con la hamiltoniana

- $\dfrac{\partial L}{\partial q_k} = -\dfrac{\partial H}{\partial q_k} \quad \forall k \in \{1,\dots,m\}$ En efecto, si se tiene en cuenta que en la ecuación 2 las $\dot q_i$ realmente representan funciones de q_j, p_j, t, se sigue

  $$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k} - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\frac{\partial \dot q_i}{\partial q_k} + \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot q_i}{\partial q_k}$$

  de donde, teniendo en cuenta la ecuación 1, se obtiene

  $$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k} - \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot q_i}{\partial q_k} + \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot q_i}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k}$$

  como se quería demostrar.

- $\dot q_k = \dfrac{\partial H}{\partial p_k}$ en este caso, partiendo de la definición del hamiltoniano y derivando respecto a p_k teniendo en cuenta que en la ecuación 2 las $\dot q_i$ realmente representan funciones de q_j, p_j, t, se puede escribir

  $$\frac{\partial H}{\partial p_k} = -\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\frac{\partial \dot q_i}{\partial p_k} + \dot q_k + \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot q_i}{\partial p_k}$$

e insertando 1 se obtiene

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = -\sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} + \dot{q}_k + \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

que es el resultado buscado.

- $\dfrac{\partial L}{\partial t} = -\dfrac{\partial H}{\partial t} \quad \forall k \in \{1, \ldots, m\}$ En efecto, si se tiene en cuenta que en la ecuación 2 las $\dot{q}_i$ realmente representan funciones de q_j, p_j, t, se sigue

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t} + \sum_{i=1}^{m} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t}$$

de donde, teniendo en cuenta la ecuación 1, se obtiene

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

como se quería demostrar.

Partiendo de las ecuaciones del movimiento se tienen las *ecuaciones de Hamilton*

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dot{q}_k & = & \dfrac{\partial H}{\partial p_k} \\[2ex] \dot{p}_k & = & -\dfrac{\partial H}{\partial q_k} \end{array} \right. \qquad \forall k \in \{1, \ldots, m\} \tag{3}$$

que determinan la evolución del sistema en el espacio de fases. Las ecuaciones de Lagrange también definían la trayectoria del sistema en el epacio de fases, pero existen algunas diferencias entre el sistema de ecuaciones de Hamilton y el de ecuaciones de Lagrange:

1. las ecuaciones de Lagrange son m ecuaciones y las de Hamilton son $2m$ ecuaciones.

2. las ecuaciones de Lagrange tienen m incógnitas $q_1(t), \dots, q_m(t)$, en tanto que las ecuaciones de Hamilton tienen $2m$ incógnitas $q_1(t), \dots, q_m(t)$, $p_1(t), \dots, p_m(t)$

3. las ecuaciones de Lagrange son de segundo orden en sus incógnitas, es decir, se necesita conocer dos datos por incógnita para fijar las constantes arbitrarias (posición y velocidad inicial, por ejemplo); las ecuaciones de Hamilton son de primer orden en sus incógnitas, es decir,se necesita conocer un dato por incógnita para fijar las constantes arbitrarias (posición inicial, por ejemplo)

Además, las ecuaciones de Hamilton son tan *sencillas* en su formato que algunos autores las distinguen como más *elegantes* que las de Lagrange. Subyaciendo bajo los aspectos estéticos, puede decirse que la forma de las ecuaciones de Hamilton sugiere que los papeles de posición y momento pueden intercambiarse dejando la forma de las ecuaciones sin variación. De hecho, el conjunto de cambios de variables que pueden realizarse en las ecuaciones de Hamilton sin alterarlas, es decir la variedad de perspectivas desde las que se pueden contemplar y por tanto la cantidad de simetrías que se pueden utilizar es infinitamente más grande que en las ecuaciones de

Lagrange y en esto radica su mayor potencia. Realmente el marco hamiltoniano es el más amplio bajo el que se pueden contemplar los sistemas que evolucionan satisfaciendo un principio variacional que en mecánica se identifica con el *principio de Hamilton* obtenido en el epígrafe anterior.

La formulación de Hamilton es más potente que la de Lagrange según el criterio citado en el párrafo anterior y se emplea con preferencia cuando se trata de resolver cuestiones sobre la existencia de integrales primeras de un sistema, peridicidad de trayectorias, comportamientos estables, caóticos, etc; no obstante, para la resolución de problemas elementales de mecánica, donde el objetivo sea la obtención del sistema de ecuaciones diferenciales, aporta frecuentemente un camino más largo que el lagrangiano. En el siguiente ejemplo se muestra la obtención de las ecuaciones del movimiento de un punto material de masa m que se mueve sobre el eje horizontal x de un sistema cartesiano unido al origen mediante un resorte de constante elástica k y lonfitud natural nula.

El lagrangiano de este problema es

$$L = T - U$$

la energía cinética es

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

el potencial es

$$U = \frac{1}{2} k x^2$$

con lo que

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} k x^2$$

el momento canónico p es

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad \Rightarrow \quad \dot{x} = \frac{p}{m}$$

el hamiltoniano es

$$H = p\frac{p}{m} - (\frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 - \frac{1}{2}kx^2) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

las ecuaciones del movimiento son

$$\begin{cases} \dot{q}_k &= \dfrac{p}{m} \\ \dot{p}_k &= -kx \end{cases}$$

o bien, eliminando p

$$m\ddot{x} = -kx$$

ecuación obtenible asímismo utilizando la formulación lagrangiana directamente a partir de la función L hallada anteriormente.

En el formalismo hamiltoniano la existencia de una variable cíclica se traduce en la constancia del momento canónico conjugado. En efecto, a partir de la primera propiedad demostrada en este epígrafe, se tiene

$$0 = \frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

y a partir de la segunda ecuación de Hamilton para q_k se deduce

$$\dot{p}_k = 0 \quad \Rightarrow \quad p_k = \mathrm{cte}$$

Asímismo, cuando la función lagrangiana no sea función explícita del tiempo, entonces, por la propiedad tercera, el hamiltoniano tampoco lo será, ya que

$$0 = \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t}$$

y se deduce la conservación de la integral de Painlevé-Jacobi (como ya se ha visto). Esta integral coincide precisamente con la función hamiltoniana, ya que

$$H = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = 2L_2 + L_1 - (L_0 + L_1 + L_2) = L_2 - L_0 = P$$

lo que implica que si un hamiltoniano no depende explícitamente del tiemo, entonces se conserva. Además, esta identidad implica que en sistemas holónomos esclerónomos en los que exista función lagrangiana, la función hamiltoniana coincide con la energía. Este resultado también se obtiene directamente

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial t}$$

teniendo en cuenta las ecuaciones de Hamilton 3, se tiene

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial t}$$

de donde

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Título
Contenido
◄◄ ►►
◄ ►
Volver Atrás
Cerrar
Salir
Página 10 de 30

lo que implica que *si un hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, entonces es una constante del movimiento.* El principio del que se pueden derivar las ecuaciones de Hamilton es la estacionariedad de la integral

$$A = \int_{t_0}^{t_1} (\sum_{i=1}^{m} p_i \dot{q}_i - H)\mathrm{d}t$$

En efecto, las ecuaciones de Euler -Lagrange proporcionan

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dot{q}_i - \dfrac{\partial H}{\partial p_i} & = & 0 \\ \dot{p}_i + \dfrac{\partial H}{\partial q_i} & = & 0 \end{array} \right.$$

donde no es necesario considerar la relación 1.

3. Transformaciones canónicas

La perspectiva hamiltoniana es tan general que permite la máxima multiplicidad en el cambio de coordenadas. Sean (q_i, p_i) las coordenadas en las que el hamiltoniano es H y sean (Q_i, P_i) otras coordenadas en las que el hamiltoniano es K. Si se parte del principio de Hamilton, debe respetarse que las trayectorias que hagan estacionaria la integral

$$A = \int_{t_0}^{t_1} (\sum_{i=1}^{m} p_i \dot{q}_i - H)\mathrm{d}t$$

deben hacer estacionaria la integral

$$A' = \int_{t_0}^{t_1} (\sum_{i=1}^{m} P_i \dot{Q}_i - K)\mathrm{d}t$$

lo cual implica que

$$\sum_{i=1}^{m} p_i \mathrm{d}q_i - H\mathrm{d}t = \lambda \left(\sum_{i=1}^{m} P_i \mathrm{d}Q_i - K\mathrm{d}t + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t \right) \tag{4}$$

las transformaciones que siguen la ecuación 4 se denominan *transformaciones canónicas extensas*. Aquéllas en las que λ, es un factor de escala, es la unidad, reciben el nombre de *transformaciones canónicas propiamente dichas* o, en adelante, *transformaciones canónicas*. F es una función de las coordenadas del espacio fásico y del tiempo. Supóngase que se consideran las transformaciones

$$\left\{\begin{array}{lcl} p_i & = & p_i(q_j, P_j, t) \\ Q_i & = & Q_i(q_j, P_j, t) \end{array}\right.$$

y se parte de la ecuación 4 ligeramente transformada

$$\sum_{i=1}^{m} p_i \mathrm{d}q_i - H\mathrm{d}t = -\sum_{i=1}^{m} Q_i \mathrm{d}P_i - K\mathrm{d}t + \frac{\mathrm{d}F + \sum_{i=1}^{m} Q_i P_i}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t \qquad (5)$$

Sea $S = F + \sum_{i=1}^{m} Q_i P_i$ otra función del espacio de fases y el tiempo expresada en función de q_i, P_i, t, es decir, $S = S(q_i, P_i, t)$. Entonces, la ecuación 5 se escribe

$$\sum_{i=1}^{m} \left(p_i - \frac{\partial S}{\partial q_i} \right) \mathrm{d}q_i - \left(H + \frac{\partial S}{\partial t} \right) \mathrm{d}t = -\sum_{i=1}^{m} \left(Q_i + \frac{\partial S}{\partial P_i} \right) \mathrm{d}P_i - K\mathrm{d}t$$

de donde

$$\left\{\begin{array}{lcl} p_i & = & \dfrac{\partial S}{\partial q_i} \\ Q_i & = & -\dfrac{\partial S}{\partial P_i} \\ K & = & H + \dfrac{\partial S}{\partial t} \end{array}\right.$$

es decir, cualquier transformación canónica tiene una S y ésta define la transformación. La función S se conoce como *generadora* de la transformación. En este punto, puede preguntarse sobre la transformación de coordenadas S que haga nulo el nuevo hamiltoniano, es decir,

$$H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

o bien

$$H(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{6}$$

ecuación que recibe el nombre de *ecuación de Hamilton-Jacobi* . Si se encuentra una solución $S(q_i, P_i, t)$ donde P_i sean m constantes, entonces

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial S}{\partial q_i} = f(q_i, P_{i0}, t) \\ Q_{i0} = -\dfrac{\partial S}{\partial P_i} = g(q_i, P_{i0}, t) \end{cases}$$

el segundo conjunto de m ecuaciones permite despejar las m q_i en función del tiempo y de las $2m$ constantes Q_i, P_i (su hamiltoniano es nulo). EL primer conjunto de ecuaciones determina los momentos en función del tiempo y las $2m$ constantes.

Por lo tanto, una solución particular en función de m constantes independientes (sin considerar la constante aditiva que siempre se puede introducir) de la ecuación de Hamilton-Jacobi (lo que se conoce como una solución completa de la misma), determina la solución general de las ecuaciones de Hamilton. La función S recibe el nombre de *función principal de Hamilton*.

Por ejemplo, para un sistema formado por un punto material libre obligado a moverse sobre un eje vertical en un campo gravitatorio, se tiene

$$H = \frac{p^2}{2m} + mgz$$

la ecuación de Hamilton-Jacobi es

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 + mgz + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

como H, K son constantes, entonces

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E$$

y queda

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 = E - mgz$$

con lo que

$$\frac{\partial S}{\partial z} = m\sqrt{2g}\sqrt{(\frac{E}{mg} - z)}$$

integrando

$$S = -\frac{2}{3}m\sqrt{2g}(\frac{E}{mg} - z)^{3/2} - Et$$

con lo que, si A es una consante arbitraria,

$$A = -\sqrt{2/g}\sqrt{\frac{E}{mg} - z} - t$$

con lo que

$$z = C + Dt - t^2 g/2$$

como debía suceder.

La función S tiene un significado especial. Si se recuerda la expresión de la integral de acción

$$A = \int_{t_0}^{t_1} (\sum_{i=1}^{m} p_i \dot{q}_i - H)\mathrm{d}t$$

y se estudia su variación al cambiar las coordenadas del punto de llegada y su tiempo, se tiene

$$\mathrm{d}A = (\sum_{i=1}^{m} p_i \dot{q}_i - H)\mathrm{d}t$$

de forma que $p_i = \dfrac{\partial A}{\partial q_i}$, con lo que

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -H(q_i, \frac{\partial A}{\partial q_i}, t)$$

es decir, A satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi. De hecho, cualquier solución completa de esta ecuación representa la acción correspondiente a cada punto desde una superficie origen determinada.

4. Ecuaciones de eikonal y de Schroedinger

La ecuación de ondas para longitud $\lambda = 2\pi/k$ es

$$\nabla^2 U = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = -k^2 U$$

determina la propagación ondulatoria del escalar U. Si se efectúa el cambio

$$U = A \exp(i\varphi)$$

se tiene entonces el par de ecuaciones

$$\frac{1}{A}\nabla^2 A - (\nabla\varphi)^2 = -k^2$$

$$\frac{2}{A}\nabla A \cdot \nabla\varphi + \nabla^2\varphi = 0$$

la primera de ellas, en las zonas en que la función A varía poco en una longitud de onda, se traduce en la ecuación *eikonal*[1]

$$(\nabla\varphi)^2 = k^2$$

que rige la distribución espacial fase de la onda cuando se satisfacen las condiciones de la óptica geométrica (λ es muy pequeña en comparación con las dimensiones típicas del problema, como las longitudes de variabilidad de k, dimensiones de los objetos, etc). Esta ecuación representa la propagación

[1]del griego $\epsilon\iota\kappa\omega\nu$ imagen, retrato

de un campo con una velocidad k constante en el sentido que asigna a cada punto, la longitud desde una superficie arbitraria, multiplicada por k. Refleja la imagen de Huyghens del comportamiento de un frente de ondas esféricas en el que cada punto se convierte asímismo en el centro de una nueva onda, determinando una forma de propagación en la que el tiempo necesario para alcanzar un punto desde una superficie inicial es φ/ω.

La forma que tiene la ecuación eikonal

$$(\nabla\varphi)^2 = k^2$$

y la de Hamilton-Jacobi, para un punto material en un campo potencial cuando se usan coordenadas cartesianas en un sistema de energía E es

$$(\nabla S)^2 = 2m(E - U)$$

lo que evoca la similitud de las ecuaciones de la mecánica y la óptica, como fue puesto de manifiesto por Hamilton. Si la similitud entre las ecuaciones entre la mecánica del sólido y la óptica es válida para longitudes de onda pequeñas sin más que cambiar k^2 por $\frac{8\pi^2 m(E-U)}{h}$ y la ecuación ondulatoria rige el comportamiento de la óptica cuando se desea mayor precisión, es lógico pensar que la ecuación de ondas puede regir también la evolución más fina de sistemas mecánicos que evolucionen en espacios reducidos. Esta reflexión llevó al físico austriaco Erwin Schroedinger a proponer la ecuación ondulatoria de la mecánica

$$\nabla^2\Psi = -\frac{8\pi^2 m(E - U)}{h^2}\Psi$$

donde se ha utilizado la relación propuesta por De Broglie $\frac{k}{2\pi} = \frac{1}{\lambda} = p/h = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{h}$

5. Corchetes de Poisson

Si se considera el espacio de $2m+1$ dimensiones consistente en el espacio de fases ampliado con la dimensión temporal, la forma lineal

$$\omega = p_i \mathrm{d}q_i - H\mathrm{d}t \tag{7}$$

no es un invariante canónico, a la vista de la ecuación 4. Sin embargo, su derivada exterior sí lo es, considerando las transformaciones en las que $\lambda = 1$. En efecto, por el lema de Poincaré, $\mathrm{dd}F = 0$. La restricción de $\mathrm{d}\omega$ al espacio de fases $2m$ dimensional también será un invariante, con lo que la forma

$$\sum_{i=1}^{m} \mathrm{d}q_i \wedge \mathrm{d}p_i$$

es un invariante canónico y define una estructura *simpléctica* en el espacio de fases. Esta forma, según se ha visto en el apéndice B, asigna a cada tangente del espacio de fases una forma lineal y a la inversa, asigna a cada forma lineal, un vector tangente. Esto implica que se define una operación que a cada dos formas lineales le asigna un escalar. Esta operación,que es, como se ha dicho, un invariante canónico, puede aplicarse a cualquier función (a sus gradientes) del espacio de fases y del tiempo. Esta operación bilineal se conoce como *corchetes de Poisson* y se denota $[f, g]$. Se evalúa, obviamente, mediante la siguiente fórmula

$$[f, g] = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}$$

Es importante reivindicar el carácter intrínseco de esta operación, para lo que se presentará un símil con otra operación bien conocida. En un espacio vectorial euclídeo en el que se realice un estudio geométrico, la formulación de teoremas, leyes, etc utilizando coordenadas cartesianas en una referencia determinada exige la comprobación rigurosa de la invarianza frente a cambios de referencia; sin embargo, si se formulan utilizando operaciones intrínsecas como el producto escalar, esta comprobación no es necesaria, además de simplificar las expresiones dado que el lenguaje utilizado es más próximo a las características *intrínsecas* del sistema. Pues bien, Dado el carácter intrínseco del corchete de Poisson entre funciones del espacio de fases, las leyes formuladas utilizándolo, gozarán de validez en cualquier sistema canónico de coordenadas.

Por ejemplo, dada una función del espacio de fases $F = F(q_i, p_i, t)$ y del tiempo, las ecuaciones de Hamilton 3 permiten calcular su derivada temporal a lo largo de una trayectoria cualquiera que satisfaga dichas ecuaciones

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i$$

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

es decir

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, H] \tag{8}$$

La mecánica cuántica, que contiene a la mecánica clásica como límite cuando $h \to 0$, se formula con leyes que son transcriptibles a la formulación hamiltoniana con corchetes de Poisson. La ecuación que rige la evolución de los estados mecánica cuántica es

$$i\frac{h}{2\pi}\frac{\mathrm{d}|\Psi>}{\mathrm{d}t} = H|\Psi>$$

y para un observable F, definido por un operador hermítico, se tiene, por definición

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = D$$

si y sólo si para todo par de estados $|\Psi>, |\Phi>$

$$\frac{\mathrm{d}<\Phi|F|\Psi>}{\mathrm{d}t} =<\Phi|D|\Psi>$$

de modo que

$$\frac{\mathrm{d}<\Phi|F|\Psi>}{\mathrm{d}t} =<\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}|F|\Psi> + <\Phi|\frac{\partial F}{\partial t}|\Psi> + <\Phi|F|\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t}>$$

con lo que

$$\frac{\mathrm{d}<\Phi|F|\Psi>}{\mathrm{d}t} = -(i\frac{h}{2\pi})^{-1} <\Psi|HF|\Psi> + <\Phi|\frac{\partial F}{\partial t}|\Psi> +(i\frac{h}{2\pi})^{-1} <\Phi|FH|\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t}>$$

y se puede escribir

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\frac{h}{2\pi}}[F,H] + \frac{\partial F}{\partial t}$$

que recuerda a la ecuación 8. En efecto, se puede enunciar el principio de correspondencia entre el anticonmutador de los operadores cuánticos A, B y el corchete de Poisson de sus contrapartidas clásicas a, b

$$[A, B] \Rightarrow i\frac{h}{2\pi}[a, b]$$

Por ejemplo, $[Q, P] = ih/(2\pi)$ representa la imposibilidad de conocer simultáneamente la posición y velocidad de un punto *principio de indeterminación de Heisenberg*, que, si $h = 0$, desaparece. De hecho, toda la mecánica clásica formulada con los corchetes de Poisson puede formularse a partir de la cuántica , con la correspondencia citada y haciendo $h \to 0$

6. Simetrías

Un grupo especial de transformaciones canónicas lo constituyen las transformaciones canónicas infinitesimales. Sea S_α la función generatriz de una familia de parámetro α de transformaciones canónicas. Para el valor α se pasa de las coordenadas Q_i, P_i a las coordenadas q_i, p_i y para el valor $\alpha + \Delta\alpha$ a $q_i + \Delta q_i, p_i + \Delta p_i$ .Considerando que $\Delta\alpha$ es infinitesimal, se tiene

$$\sum_{i=1}^{m} P_i \mathrm{d}Q_i - p_i \mathrm{d}q_i = \mathrm{d}S(q_i, Q_i, \alpha, t)$$

$$\sum_{i=1}^{m} P_i \mathrm{d}Q_i - (p_i + \Delta p_i)\mathrm{d}(q_i + \Delta q_i) = \mathrm{d}S(q_i + \Delta q_i, Q_i, \alpha + \Delta\alpha, t)$$

$$S(q_i + \Delta q_i, Q_i, \alpha + \Delta\alpha, t) = S(q_i, Q_i, \alpha, t) + \sum_{i=1}^{m} p_i \Delta q_i + \frac{\partial S}{\partial \alpha}\Delta\alpha$$

restando queda

$$\sum_{i=1}^{m} \Delta p_i \mathrm{d}q_i - \Delta q_i \mathrm{d}p_i = \mathrm{d}\frac{\partial S}{\partial \alpha}\Delta\alpha$$

expresando $G = -\dfrac{\partial S}{\partial \alpha}$ en función de q_i, p_i, α, t, se tiene

$$\Delta q_i = \frac{\partial G}{\partial p_i}\Delta\alpha$$

Título
Contenido
◄◄ ►►
◄ ►
Volver Atrás
Cerrar
Salir
Página 24 de 30

$$\Delta p_i = -\frac{\partial G}{\partial q_i}\Delta\alpha$$

Sea $F = F(q_i, p_i, t)$ una función a la que se desea aplicar la transformación canónica elemental G. Se tiene entonces

$$\Delta F = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial F}{\partial q_i}\Delta q_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\Delta p_i$$

$$\Delta F = (\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i})\mathrm{d}\alpha$$

$$\Delta F = [F, G]\mathrm{d}\alpha$$

expresión canónica que representa una transformación infinitesimal aplicada a cualquier función del espacio de fases.

Dada una transformación infinitesimal definida por la función generatriz $G(q_i, p_i)$ ésta determina un conjunto de transformaciones con estructura de grupo. La función $G(q_i, p_i)$ es la generatriz del grupo. Un sistema hamiltoniano es simétrico respecto a un grupo G cuando su hamiltoniano insensible a las transformaciones del grupo. Por ejemplo, en un sistema formado por un electrón que se mueve en un campo eléctrico constante, el hamiltoniano es invariante frente al grupo de translaciones perpendiculares a la dirección del campo y por lo tanto este sistema es simétrico respecto a dicho grupo.

Si un sistema presenta simetría frente al grupo de transformaciones $G(q_i, p_i)$ entonces la función generatriz es una constante del movimiento.

En efecto, por hipótesis, para una transformación infinitesimal se tiene

$$\Delta H = 0$$

por lo que

$$[G, H] = 0$$

lo que implica que

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t} = 0$$

La búsqueda de constantes del movimiento es equivalente a la búsqueda de simetrías de un sistema mecánico. Las más importantes son las de translación y rotación. Las translaciones forman un grupo de simetrías formado por tres grupos más simples (las translaciones según tres direcciones no coplanarias del espacio). Cada una de ellas viene representada por las funciones

- eje x: p_x
- eje y: p_y
- eje z: p_z

La simetría de un sistema frente a translaciones según una dirección x origina la conservación del momento p_x. La simetría frente a una translación cualquiera determina la conservación de las tres cantidades p_x, p_y, p_z, es decir, lo que en mecánica newtoniana constituye la cantidad de movimiento.

Igualmente, las rotaciones están representadas por tres grupos elementales

Título
Contenido
◀◀ ▶▶
◀ ▶
Volver Atrás
Cerrar
Salir

- eje x: $y\,p_z - z\,p_y$
- eje y: $z\,p_x - x\,p_z$
- eje z: $x\,p_y - y\,p_x$

La simetría de un sistema frente a rotaciones en torno a un punto eje z determina la conservación de $xp_y - yp_x$ que en mecánica newtoniana equivale al momento cinético áxico. Si la simetría es respecto a cualquier rotación en torno al origen de coordenadas, se deduce la conservación de las cantidades

- $y\,p_z - z\,p_y$
- $z\,p_x - x\,p_z$
- $x\,p_y - y\,p_x$

es decir, lo que en mecánica newtoniana representa el momento cinético. Es inmediato comprobar que el corchete de Poisson es antisimétrico y que

$$[f,[g,h]] + [g,[h,f]] + [h,[f,g]] = 0 \tag{9}$$

es decir

$$[f,[g,h]] = [[f,g],h] - [[f,h],g]$$

lo que nos dice que el corchete de Poisson representa el anticonmutador de las transformaciones infinitesimales representadas por sus funciones generadoras correspondientes. La ecuación 9 se conoce como *identidad de Jacobi*. Existen numerosas operaciones binarias antisimétricas que verifican la identidad de Jacobi, tales como los anticonmutadores, el producto vectorial, etc. Estas operaciones definen estructuras conocidas como Álgebras de Lie, importantes en los modelos abstractos de la mecánica.

De esta forma, se sigue que la búsqueda de simetrías es una herramienta fundamental en la resolución de los problemas de dinámica de sistemas hamiltonianos. En este punto, la mecánica clásica y la cuántica transcurren por caminos formalmente idénticos, siendo transvasables los resultados de una a la otra.

De hecho, en la mecánica cuántica un operador F que represente un observable realiza una transformación elemental en las funciones de onda

$$\mathrm{d}|\Psi >= (i\frac{h}{2\pi})^{-1}F|\Psi > \mathrm{d}\alpha$$

que lleva aparejado un cambio en un observable cualquiera G que viene dado por

$$\mathrm{d}G = (i\frac{h}{2\pi})^{-1}[G, F]\mathrm{d}\alpha$$

Si la transformación equivalente en mecánica clásica viene dada por la función f, entonces, para una función g cualquiera del espacio de fases, se tiene

$$\mathrm{d}g = [g, f]\mathrm{d}\alpha$$

Si se toman G, F como dos transformaciones, entonces $(i\frac{h}{2\pi})^{-1}[G, F]$ representa su anticonmutador, es decir, el resultado, en el límite, de la diferencia entre las transformaciones compuestas en un orden y el inverso. Este anticonmutador es otra transformación. Algunas transformaciones en mecánica cuántica tienen su análogo en la mecánica clásica (translaciones, rotaciones sin espín, etc). Si establecemos una relación entre las funciones clásicas y los observables cuánticos consistente en representar la misma transformación, entonces necesariamente se tiene que si F, G corresponden a las funciones clásicas f, g, entonces $(i\frac{h}{2\pi})^{-1}[F, G]$ corresponde a $[f, g]$, por motivos puramente geométricos ya que son los anticonmutadores de las transformaciones respectivas. Por ejemplo, la relación

$$p_y = [p_x, \ell_z]$$

donde $l_z = xp_y - yp_z$ representa una rotación elemental en torno al eje z significa que una translación elemental paralela al eje x, seguida de una rotación elemental alrededor del eje z, una translación elemental opuesta a la primera (según el nuevo eje x) y una rotación opuesta a la anterior, resulta en una translación elemental según el eje y, quie es lo que representa p_y. Obviamente, esta relación geométrica debe preservarse en el formalismo cuántico, de modo que

$$i\frac{h}{2\pi}P_y = [P_x, L_z]$$

Por esta razón, la correspondencia entre observables cuánticos y funciones clásicas lleva, de manera intrínseca (geométricamente hablando), a la relación entre anticonmutadores y corchetes de Poisson[2].

Los corchetes de Poisson de las coordenadas canónicas (las transformaciones dadas por sus anticonmutaciones)

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

[2] Esta correspondencia se matiza con algunas ideas de mecánica cuántica que en este texto, por razones obvias, no se han presentado.

originan bien la transformación anulante o bien la identidad. Esta misma transformación ha de resultar de la anticonmutación de las correspondientes transformaciones canónicas.

$$[Q_i, P_j] = \delta_{ij} i \frac{h}{2\pi} \quad , \quad [Q_i, Q_j] = 0 \quad , \quad [P_i, P_j] = 0$$

Existe una formulación canónica de la mecánica cuántica, que partiendo de las relaciones de anticonmutación anteriores, su bilinealidad, antisimetría y la identidad de Jacobi 9, se desarrolla hasta la formulación dinámica de sus problemas. Esta formulación, no obstante, se escapa del ámbito de este trabajo.