Tema 4

Transformaciones canónicas

4.1. Ecuaciones de transformación

Las ecuaciones de Hamilton adquieren una forma sencilla de integrar en algunos casos particulares. Teniendo en cuenta que las ecuaciones son

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \end{aligned} \tag{4.1}$$

supongamos que H no depende explícitamente del tiempo y que todas las coordenadas son cíclicas. En ese caso se tiene que

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad \forall i, \tag{4.2}$$

con lo que

$$p_i = \alpha_i = \text{cte.} \tag{4.3}$$

Como H no depende explícitamente de t y todas las q_i son cíclicas

$$H = H(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n). \tag{4.4}$$

Las ecuaciones de hamilton serán, en este caso,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = \omega_i, \tag{4.5}$$

con lo que

$$q_i = \omega_i \, t + \beta_i. \tag{4.6}$$

Hemos logrado resolver las ecuaciones y obtener el movimiento, Las constantes ω_i sólo dependen de las α's (y por eso son constantes) y las β's junto con las α's se determinan a partir de las condiciones iniciales.

Como las coordenadas generalizadas las podemos elegir de muchas maneras, interesará elegirlas de manera que tengamos el mayor número de coordenadas cíclicas.

Para pasar de unas coordenadas a otras utilizamos la transformación de coordenadas del tipo

$$Q_i = Q_i(\underline{q}, t), \tag{4.7}$$

llamadas transformaciones puntuales. Pero hay que tener en cuenta que, en la formulación hamiltoniana, las coordenadas y los momentos juegan el mismo papel, con lo que nos podemos plantear transformaciones más generales que involucren tanto coordenadas como momentos. En general se tendrá

$$\begin{aligned} Q_i &= Q_i(\underline{q}, \underline{p}, t), \\ P_i &= P_i(\underline{q}, \underline{p}, t). \end{aligned} \tag{4.8}$$

Exigiremos siempre que el jacobiano de esta transformación sea diferente de cero.

De estas transformaciones sólo nos interesan aquellas en las que las nuevas coordenadas $\underline{Q}$ y momentos $\underline{P}$ estén relacionadas por las ecuaciones de Hamilton correspondientes a una nueva hamiltoniana $K(\underline{Q}, \underline{P}, t)$, esto es,

$$\begin{aligned} \dot{Q}_i &= \frac{\partial K}{\partial P_i} \\ \dot{P}_i &= -\frac{\partial K}{\partial Q_i}. \end{aligned} \tag{4.9}$$

A estas transformaciones las llamaremos *transformaciones canónicas.*

4.2. Funciones generadoras

A fin de obtener las posibles transformaciones canónicas usaremos el principio de Hamilton modificado, a partir del cual se obtienen las ecuaciones canónicas.

El principio de Hamilton para las variables $\underline{q}$ y $\underline{p}$ nos dice que

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i p_i \, \dot{q}_i - H(\underline{q}, \underline{p}, t) \right) \mathrm{d}t = 0, \tag{4.10}$$

y para las coordenadas transformadas $\underline{Q}$ y $\underline{P}$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i P_i \, \dot{Q}_i - K(\underline{Q}, \underline{P}, t) \right) \mathrm{d}t = 0. \tag{4.11}$$

Para que se cumpla el principio de Hamilton en los dos casos el integrando, salvo una constante de proporcionalidad (λ), debe diferir sólo en la derivada total respecto al tiempo de una función

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} \tag{4.12}$$

ya que

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} \, \mathrm{d}t = 0, \tag{4.13}$$

es decir, se debe cumplir que

$$\lambda \left(\sum_i p_i \, \dot{q}_i - H(\underline{q}, \underline{p}, t) \right) = \left(\sum_i P_i \, \dot{Q}_i - K(\underline{Q}, \underline{P}, t) \right) + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}. \tag{4.14}$$

A la constante de proporcionalidad λ se le llama *valencia* de la transformacón y, salvo que se diga lo contrario, tomaremos $\lambda = 1$.

A la función F la llamaremos función generadora ya que si conocemos F podremos obtener la transformación. Estudiaremos los casos siguientes, en los que los diferentes tipos de función F vienen caracterizados por cuáles son las variables de las que depende,

$$F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t); \quad F_2(\underline{q}, \underline{P}, t); \quad F_3(\underline{p}, \underline{Q}, t); \quad F_4(\underline{p}, \underline{P}, t), \tag{4.15}$$

aunque también podemos tener situaciones mixtas, en los que la función F puede ser de un tipo para unas variables y de otro tipo para otras variables.

Veamos cuál es la transformación en el primer caso:

$$\sum_i p_i \, \dot{q}_i - H = \sum_i P_i \, \dot{Q}_i - K + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t), \tag{4.16}$$

con

$$\frac{\mathrm{d}F_1}{\mathrm{d}t} = \sum \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{4.17}$$

se tendrá

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \\ K &= H + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \end{aligned} \tag{4.18}$$

Las n ecuaciones $p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}$ nos permitirán obtener la variables $\underline{Q}$ en función de $\underline{q}$, $\underline{p}$ y t (para ello debemos tener que det $\left(\partial \underline{p}/\partial \underline{Q}\right) = $ det $\left(\partial^2 F_1/\partial \underline{q}\partial \underline{Q}\right) \neq 0$,). Las n ecuaciones $P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$ nos permiten obtener los momentos conjugados $\underline{P}$ en función de $\underline{q}$, $\underline{p}$ y t. Por último, la ecuación $K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$ nos permite obtener la nueva hamiltoniana. La función $F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t)$ que nos ha permitido obtener la transformación canónica la llamaremos función generadora de la transformación (o función generatriz).

Si en lugar de las variables $\underline{q}$ y $\underline{Q}$ quisiéramos usar las variables $\underline{q}$ y $\underline{P}$ podríamos tomar como función generadora la transformada de Legendre de F_1:

$$F_2(\underline{q}, \underline{P}, t) = F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t) + \sum P_i\, Q_i, \tag{4.19}$$

ya que

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}F_2}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i + \sum Q_i \dot{P}_i + \sum P_i \dot{Q}_i = \\ \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum Q_i \dot{P}_i,\end{aligned} \tag{4.20}$$

con lo que

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_2}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \sum \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum Q_i \dot{P}_i \Rightarrow \\ \frac{\partial F_2}{\partial t} = \frac{\partial F_1}{\partial t}; \quad \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}; \quad \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = Q_i\end{aligned} \tag{4.21}$$

y

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \\ K &= H + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \end{aligned} \tag{4.22}$$

En este caso de debe poder despejar $\underline{P}$, con lo que debemos exigir det $\left(\partial^2 F_2/\partial \underline{q}\partial \underline{P}\right) \neq 0$.

El tercer tipo de función $F_3(\underline{p}, \underline{Q}, t)$ se obtiene haciendo la transformada de Legendre

$$F_3(\underline{p}, \underline{Q}, t) = F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t) - \sum p_i q_i, \tag{4.23}$$

con det $\left(\partial^2 F_3/\partial \underline{p}\partial \underline{Q}\right) \neq 0$, y se llega a

$$\begin{aligned} q_i &= -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} \\ P_i &= -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \\ K &= H + \frac{\partial F_3}{\partial t}. \end{aligned} \tag{4.24}$$

Por último, si queremos las variables $\underline{p}$ y $\underline{P}$, $F_4(\underline{p}, \underline{P}, t)$ tomamos la transformada siguiente

$$F_4(\underline{p}, \underline{P}, t) = F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t) - \sum p_i q_i + \sum P_i Q_i, \tag{4.25}$$

con det $\left(\partial^2 F_4/\partial \underline{p}\partial \underline{P}\right) \neq 0$, llegando a

$$\begin{aligned} q_i &= -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \\ Q_i &= \frac{\partial F_4}{\partial P_i} \\ K &= H + \frac{\partial F_4}{\partial t}. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Un propiedad muy importante de las transformaciones canónicas es que el corchete de Poisson es invariante bajo transformaciones canónicas[1]. Esto es, si f y g dos variables dinámicas, se tiene que

$$[f, g]_{\underline{q},\underline{p}} = [\tilde{f}, \tilde{g}]_{\underline{Q},\underline{P}}, \tag{4.27}$$

donde $\tilde{f}$ denota la función transformada mediante la transformación canónica, es decir

$$\tilde{f}\left(\underline{Q}, \underline{P}, t\right) = f\left(\underline{q}(\underline{Q}, \underline{P}, t), \underline{p}(\underline{Q}, \underline{P}, t), t\right). \tag{4.28}$$

Si lo aplicamos a $\tilde{f} = Q_i$ y $\tilde{g} = P_j$ se tiene

$$[Q_i, P_j]_{\underline{Q},\underline{P}} = \delta_{ij} = [Q_i((\underline{q}, \underline{p}, t)), P_j((\underline{q}, \underline{p}, t))]_{\underline{q},\underline{p}}. \tag{4.29}$$

Hay un teorema que nos caracteriza las transformaciones canónicas de manera muy simple. Una transformación invertible

$$(\underline{q}, \underline{p}) \to (\underline{Q}, \underline{P}) \tag{4.30}$$

[1]Si la valencia de la transformación no es la unidad aparecería ésta a transforma el corchete de Poisson

es canónica si y sólo si

$$[Q_i, Q_j]_{\underline{q},\underline{p}} = [P_i, P_j]_{\underline{q},\underline{p}} = 0; \quad [Q_i, P_j]_{\underline{q},\underline{p}} = \delta_{ij}. \tag{4.31}$$

Señalar también que el conjunto de las transformaciones canónicas forman un grupo con la composición de transformaciones como operación binaria (ley de composición interna, cumpliéndose las propiedades asociativa, elemento neutro y simétrico.

Veamos algunos ejemplos de transformaciones canónicas a partir de la función generadora.

1. Función generadora $F_2(\underline{q}, \underline{P}, t) = \sum q_i P_i$:

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i \\ Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i, \end{aligned} \tag{4.32}$$

   que no es más que la transformación identidad.

2. Función generadora $F_2(\underline{q}, \underline{P}, t) = \sum f_i(\underline{q}, t) P_i$:

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \sum_j \frac{f_j}{q_i} P_j \\ Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = f_i(\underline{q}, t), \end{aligned} \tag{4.33}$$

   que es una transformación puntual ya que las nuevas coordenadas sólo dependen de las antiguas y del tiempo. Se tiene que

$$K = H + \sum \frac{\partial f_i}{\partial t} P_i. \tag{4.34}$$

3. Función generadora $F_2(\underline{q}, \underline{P}, t) = \sum_{ik} a_{ik} q_k P_i$, siendo (a_{ik}) una matriz ortogonal. Se tiene que

$$\begin{aligned} Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = \sum_k a_{ik} P_k \\ p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = \sum_j a_{ji} P_j, \end{aligned} \tag{4.35}$$

   que en forma matricial escribimos

$$\begin{aligned} \mathsf{Q} &= \mathsf{A}\,\mathsf{q} \\ \mathsf{p} &= \mathsf{A}^T \mathsf{P} \end{aligned} \tag{4.36}$$

donde $\mathsf{A} = (a_{ij})$ y q, p, Q y P representan matrices columnas formadas por coordenadas o momentos. Se observa que tanto las coordenadas como los momentos se transforman mediante una matriz ortogonal.

4. Función generadora $F_1(\underline{q}, \underline{Q}, t) = \sum_j q_j Q_j$.

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_1}{\partial q_i} = Q_i \\ P_i &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} = -q_i \\ K &= H \quad \Rightarrow \quad K(\underline{Q}, \underline{P}) = H(\underline{q}, \underline{p}) = H(-\underline{P}, \underline{Q}). \end{aligned} \tag{4.37}$$

Esta transformación intercambia los papeles de $\underline{q}$ y $\underline{p}$, poniendo de manifiesto que el papel jugado por las coordenadas y momentos en la formulación hamiltoniana son completamente equivalentes.

Veamos cómo usar las transformaciones canónicas para resolver el problemas del oscilador armónico

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k\, q^2 = \frac{1}{2m} \left(p^2 + (m\,\omega\, q)^2\right), \tag{4.38}$$

donde $\omega^2 = k/m$.

Como en la hamiltoniana aparecen los sumandos p^2 y $(m\,\omega\, q)^2$ podemos plantearnos una transformación del tipo

$$\begin{aligned} q &= \frac{f(P)}{m\,\omega} \sin Q \\ p &= f(P) \cos Q, \end{aligned} \tag{4.39}$$

ya que, de esa manera, al sustituir en la hamiltoniana, la variable Q no aparecería, donde $f(P)$ es una función a determinar. Obtengamos la función generadora del tipo $F_1(q, Q)$ que nos dé esta transformación. Par ello, observemos que $p = m\,\omega\, q \cot Q$, y haciendo uso de las ecuaciones de transformación

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial q} = p = m\,\omega\, q \cot Q \quad &\Rightarrow \quad F_1 = \frac{1}{2} m\,\omega\, q^2 \cot Q + g(Q) \\ \frac{\partial F_1}{\partial Q} = P \quad &\Rightarrow \quad P = \frac{1}{2} m\,\omega\, q^2 \csc^2 Q + \mathrm{d}g/\mathrm{d}Q. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Tomando $g(Q) = 0$ llegamos a que $f(P) = \sqrt{\frac{2P}{m\,\omega}}$ con lo que

$$\begin{aligned} q &= \sqrt{\frac{2P}{m\,\omega}} \sin Q \\ p &= \sqrt{2m\,\omega\, P} \cos Q. \end{aligned} \tag{4.41}$$

La nueva hamiltoniana, al no depender F_1 explícitamente del tiempo será

$$K(Q,P) = H\left(\sqrt{\frac{2P}{m\,\omega}}\sin Q, \sqrt{2m\,\omega\,P}\cos Q\right) = \omega\,P. \tag{4.42}$$

Las nuevas ecuaciones de Hamilton se reducen a

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{\partial K}{\partial P} = \omega \\ \dot{P} &= -\frac{\partial K}{\partial Q} = 0, \end{aligned} \tag{4.43}$$

que se integran inmediatamente obteniéndose

$$\begin{aligned} P &= E/\omega, \\ Q &= \omega\,t + \delta, \end{aligned} \tag{4.44}$$

donde E es la energía, que se mantiene constante. Volviendo ahora a las coordenadas y momentos originales, q y p tenemos

$$\begin{aligned} q &= \sqrt{\frac{2E}{m\,\omega^2}}\sin(\omega\,t+\delta) \\ p &= \sqrt{2m\,E}\cos(\omega\,t+\delta), \end{aligned} \tag{4.45}$$

con lo que hemos resuelto el problema mediante el uso de una transformación canónica.

4.3. Transformaciones canónicas infinitesimales.

Consideremos ahora transformaciones canónicas en las que las nuevas coordenadas difieren sólo en un infinitésimo de las antiguas

$$\begin{aligned} Q_i &= q_i + \delta q_i \\ P_i &= p_1 + \delta p_i. \end{aligned} \tag{4.46}$$

La función generadora sólo diferirá de la identidad en un infinitésimo,

$$F_= \sum q_i\,P_i + \varepsilon\,G(\underline{q},\underline{P}), \tag{4.47}$$

con ε un parámetro infinitesimal. A G le llamaremos función generadora infinitesimal.

A partir de las ecuaciones de transformación

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F_2}{\partial q_i} &= p_i = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \\
\frac{\partial F_2}{\partial P_i} &= Q_i = Q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i},
\end{aligned}
\tag{4.48}
$$

que, si nos quedamos a orden ε tenemos

$$
\begin{aligned}
\delta q_i &= \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \\
\delta p_i &= -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}.
\end{aligned}
\tag{4.49}
$$

Como $\underline{p}$ difiere de $\underline{P}$ en un infinitésimo, la función generadora infinitesimal se puede considerar, a orden ε, como una función de $\underline{q}$ y $\underline{p}$, $G(\underline{q}, \underline{p})$.

Como aplicación de estas expresiones podemos tomar G como la hamiltoniana y ε como $\mathrm{d}t$, con esto

$$
\begin{aligned}
\delta q_i &= \mathrm{d}t \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \, \mathrm{d}t = \mathrm{d}q_i \\
\delta p_i &= -\mathrm{d}t \frac{\partial H}{\partial q_i} = \dot{p}_i \, \mathrm{d}t = \mathrm{d}p_i,
\end{aligned}
\tag{4.50}
$$

que nos permite conocer q_i y p_i en $t+\delta t$ si los conocemos en t. El movimiento del sistema en el intervalo $\mathrm{d}t$ lo podemos interpretar como una transformación canónica infinitesimal generada por la Hamiltoniana. El movimiento en un tiempo finito de t_0 a t viene representado por una sucesión de transformaciones canónicas infinitesimales, que será una transformación canónica. Podemos entonces obtener los valores de $\underline{q}$ y $\underline{p}$ en t a partir de los valores en t_0, $\underline{q}_0$ y $\underline{p}_0$ mediante una transformación canónica siendo la hamiltoniana la función generadora del movimiento.

Familia de transformaciones canónicas

Las transformaciones canónicas infinitesimales generan una familia de transformaciones finitas. Basta considerar $\varepsilon = \mathrm{d}\theta$, donde θ es el parámetro de la familia de transformaciones, y escribir

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}\theta} &= [q_i, G] = \frac{\partial G}{\partial p_i},\\ \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}\theta} &= [p_i, G] = -\frac{\partial G}{\partial q_i}.\end{aligned} \tag{4.51}$$

Si integramos estas ecuaciones obtendremos

$$\begin{aligned}q_i(\theta) &= q_i(\underline{q}(0), \underline{p}(0), \theta),\\ p_i(\theta) &= p_i(\underline{q}(0), \underline{p}(0), \theta),\end{aligned} \tag{4.52}$$

que representa una familia de transformaciones canónicas en la que $\theta = 0$ se corresponde con la transformación identidad.
Para una vasriable dinámica $u(\underline{q}, \underline{p})$ se tiene que

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\theta} = \sum\left(\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}\theta} + \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}\theta}\right) = \sum\left(\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) = [u, G]. \tag{4.53}$$

Desarrollando u alrededor de $\theta = 0$ podemos escribir

$$\begin{aligned}u(\theta) \equiv u(\underline{q}(\theta), \underline{p}(\theta)) &= \\ u(\underline{q}(0), \underline{p}(0)) + [u, G]|_0\,\theta + \frac{1}{2!}\,[u, [u, G]]|_0\,\theta^2 + \dots & \\ \equiv u\,\exp\,(\hat{G}\,\theta)\Big|_0\,, &\end{aligned} \tag{4.54}$$

donde, para cualquier variable dinámica f, se tiene que $f\hat{G} \equiv [f, G]$.
Si tomamos G como la hamiltoniana, que es la generadora de evolución temporal, se tendrá que $\theta = t$ y tomando u como q_i y p_i obtendremos

$$\begin{aligned}q_i(t) = &\equiv q_i\,\exp\,(\hat{H}\,t)\Big|_0\\ p_i(t) = &\equiv p_i\,\exp\,(\hat{H}\,t)\Big|_0\,.\end{aligned} \tag{4.55}$$

Se propone como ejercicio aplicar este resultado al caso del oscilador armónico unidimensional

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\,\omega^2\,q^2. \tag{4.56}$$

4.4. Simetrías y leyes de conservación. Teorema de Noether

Consideremos la transformación infinitesimal $(\delta \underline{q}, \delta \underline{p})$ y obtengamos el cambio que experimenta una variable dinámica $u(\underline{q}, \underline{p})$ al efectuar esta transformación. Denotaremos por δu lo siguiente

$$\delta u = u(\underline{q} + \delta \underline{q}, \underline{p} + \delta \underline{q}) - u(\underline{q}, \underline{p}). \tag{4.57}$$

A primer orden se tiene

$$\delta u = \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial u}{\partial p_i} \delta p_i \right). \tag{4.58}$$

Si G denota la función generadora de la transformación infinitesimal se tiene que

$$\delta u = \varepsilon \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial u}{\partial p_i} \right) = \varepsilon [u, G]. \tag{4.59}$$

Aplicando a la hamiltoniana (si esta es independiente de t) obtenemos

$$\delta H = \varepsilon [H, G]. \tag{4.60}$$

Si G es una constante de movimiento, entones $[G, H] = 0$ con lo que

$$\delta H = 0. \tag{4.61}$$

Es decir, las constantes de movimiento son las generadoras de las transformaciones infinitesimales que dejan invariante la hamiltoniana. Las propiedades de simetría de la hamiltoniana nos permiten obtener transformaciones bajo las cuales la hamiltoniana es invariante y, por tanto, obtener las constantes de movimiento. Esto es el teorema de Noether en la formulación hamiltoniana. Veamos algún ejemplo.

Sistema de partículas con interacciónentre ellas.

$$H = \sum_a \frac{p_{xa}^2 + p_{ya}^2 + p_{za}^2}{2m_a} + \frac{1}{2} \sum_{a,b,a \neq b} U_{ab} \left(\sqrt{(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2} \right). \tag{4.62}$$

Se observa que H es invariante bajo la transformación infinitesimal de traslación en la dirección del eje x:

$$\begin{aligned} \delta x_a &= \varepsilon \quad \delta y_a = 0 \quad \delta z_a = 0 \\ \delta p_{xa} &= 0 \quad \delta p_{ya} = 0 \quad \delta p_{za} = 0 \quad \forall a. \end{aligned} \tag{4.63}$$

Bosquemos una función generadora de la transformación

$$\begin{aligned} \delta p_i &= -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \left\{ \begin{array}{lcl} \delta p_{xa} &=& 0 = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial x_a} \\ \delta p_{ya} &=& 0 = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial y_a} \\ \delta p_{za} &=& 0 = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial z_a} \end{array} \right. \\ \delta q_i &= \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \left\{ \begin{array}{lcl} \delta x_a &=& \varepsilon = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_{xa}} \\ \delta y_a &=& 0 = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_{ya}} \\ \delta z_a &=& 0 = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_{za}} \end{array} \right. \end{aligned} \tag{4.64}$$

Como vemos, G sólo depende de p_{xa}:

$$G = \sum_a p_{xa} = p_x. \tag{4.65}$$

Luego la función generadora de la traslación es p_x y se conservará constante $[p_x, H] = 0$. Se tendrá tambien que $[p_y, H] = [p_z, H] = 0$, con lo que $\vec{p}, H = 0$.

La hamiltoniana que hemos descrito es también invariante bajo rotaciones infinitesimales alrededor del eje z:

$$\vec{r}_a \to \vec{r}_a + \delta\vec{r}_a, \quad \vec{p}_a \to \vec{p}_a + \delta\vec{p}_a \tag{4.66}$$

con

$$\begin{aligned} \delta\vec{r}_a &= \varepsilon\, \vec{e}_z \times \vec{r}_a \left\{ \begin{array}{lcl} \delta x_a &=& -\varepsilon\, y_a \\ \delta y_a &=& \varepsilon\, x_a \\ \delta z_a &=& 0 \end{array} \right. \\ \delta\vec{p}_a &= \varepsilon\, \vec{e}_z \times \vec{p}_a \left\{ \begin{array}{lcl} \delta p_{xa} &=& -\varepsilon\, p_{ya} \\ \delta p_{ya} &=& \varepsilon\, p_{xa} \\ \delta p_{za} &=& 0 \end{array} \right. \end{aligned} \tag{4.67}$$

La función generadora de esta transformación es

$$G = \sum_a \left(x_a p_{ya} - y_a p_{xa}\right). \tag{4.68}$$

G no es más que la componente z del momento angular total

$$\ell_z = \sum_a \ell_{za} = \sum_a \left(x_a p_{ya} - y_a p_{xa}\right). \tag{4.69}$$

Entonces ℓ_z es la función generadora de las rotaciones alrrededor del eje z, y además, $[\ell_z, H] = 0$.

De la misma menera se tendrá que ℓ_x y ℓ_y son las funciones generadoras d las rotaciones alrededor de los ejes x e y respectivamente y $[\ell_x, H] = 0$, $[\ell_y, H] = 0$, y, de aquí se sigue que $[\vec{\ell}, H] = 0$.

La función generdora de las rotaciones alrededor de un eje cuyo vector unitario es $\vec{n}$ es $\vec{\ell} \cdot \vec{n}$.

4.5. Invariante integral de Poincaré

Consideremos la transformación canónica restringida

$$(\underline{q}, \underline{p}) \to (\underline{Q}, \underline{P}). \tag{4.70}$$

Si la función generatriz es de tipo F_1 se tendrá que

$$\sum p_i \,\mathrm{d}q_i - H \,\mathrm{d}t = \sum P_i \,\mathrm{d}Q_i - K \,\mathrm{d}t + \mathrm{d}F_1. \tag{4.71}$$

A un t fijo tendremos que

$$\sum p_i \,\mathrm{d}q_i = \sum P_i \,\mathrm{d}Q_i + \mathrm{d}F_1 \Rightarrow \mathrm{d}F_1 = \sum p_i \,\mathrm{d}q_i - \sum P_i \,\mathrm{d}Q_i. \tag{4.72}$$

Consideremos ahora una curva cerrada γ en el espacio de fases $(\underline{q}, \underline{p})$ y su imagen Γ en el espacio de fases $(\underline{Q}, \underline{P})$.Podemos realizar la integral

$$\oint \mathrm{d}F_1 = \oint_\gamma \sum p_i \,\mathrm{d}q_i - \oint_\Gamma \sum P_i \,\mathrm{d}Q_i, \tag{4.73}$$

pero, al ser $\oint \mathrm{d}F_1 = 0$, se obtiene que

$$\oint_\gamma \sum p_i \,\mathrm{d}q_i = \oint_\Gamma \sum P_i \,\mathrm{d}Q_i. \tag{4.74}$$

Este resultado nos indica entonces que la integral

$$\oint_\gamma \sum p_i \,\mathrm{d}q_i \tag{4.75}$$

es invariante bajo transformaciones canónicas, es un invariante integral de primer orden. Aplicando el teorema de Green en el plano podremos escribir esta integral como

$$\iint_S \sum \mathrm{d}p_i \,\mathrm{d}q_i, \tag{4.76}$$

siendo S la superficie cuya frontera es la curva γ y resulta ser un invariante integral de segundo orden.

Como la evolución de un sistema hamiltoniano entre los instantes t_0 y t_1 se puede considerar como una transformación canónica, aplicando el resultado anterior, se concluye que la integral

$$\oint_\gamma \sum p_i \,\mathrm{d}q_i \tag{4.77}$$

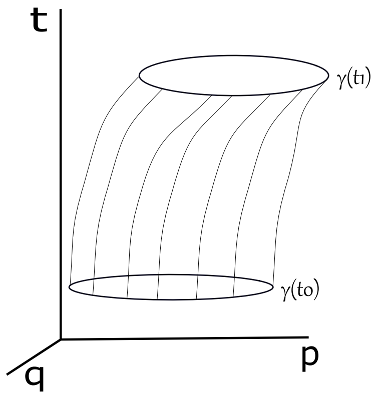

Figura 4.1: Invariante de Poincaré.

es constante a lo largo de la evolución, es decir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\oint_\gamma \sum p_i\,\mathrm{d}q_i = 0, \tag{4.78}$$

o, también,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iint_S \sum \mathrm{d}p_i\,\mathrm{d}q_i = 0. \tag{4.79}$$

4.6. Teorema de Liouville

El volumen de una región de espacio fásico lo definimos como la siguiente integral múltiple

$$\Gamma = \int \cdots \int \mathrm{d}q_1 \ldots \mathrm{d}q_n\,\mathrm{d}p_1 \ldots \mathrm{d}p_n. \tag{4.80}$$

Nos podemos plantear si esta definición es invariante bajo transformaciones canónicas. Es decir, si realizamos una transformación canónica y pasamos de las variables $(\underline{q}, \underline{p})$ a las $(\underline{Q}, \underline{P})$, ¿se tendrá que

$$\Gamma = \int \cdots \int \mathrm{d}Q_1 \ldots \mathrm{d}Q_n\,\mathrm{d}P_1 \ldots \mathrm{d}P_n, \tag{4.81}$$

donde la integral se realiza sobre la región transformada?

Sabemos que al realizar un cambio de variable se tiene de $(\underline{q},\underline{p})$ a $(\underline{Q},\underline{P})$ se tiene

$$\int\cdots\int \mathrm{d}q_1\ldots\mathrm{d}q_n\,\mathrm{d}p_1\ldots\mathrm{d}p_n = \int\cdots\int\left|\frac{\partial(q_1\ldots q_n p_1\ldots p_n)}{\partial(Q_1\ldots Q_n P_1\ldots P_n)}\right|\mathrm{d}Q_1\ldots\mathrm{d}Q_n\,\mathrm{d}P_1\ldots\mathrm{d}P_n \tag{4.82}$$

con lo que, para que se cumpla la invariancia, el jacobiano de la transformación debe ser igual 1,

$$\left|\frac{\partial(q_1\ldots q_n p_1\ldots p_n)}{\partial(Q_1\ldots Q_n P_1\ldots P_n)}\right| = 1. \tag{4.83}$$

Para demostrar que este jacobiano es igual a la unidad si la transformación es canónica y generada por una función del tipo $F_2(\underline{q},\underline{P},t)$ nos basamos en la siguiente propiedad de los jacobianos que se cumple si las $\underline{q}$ y $\underline{P}$ son independientes

$$\left|\frac{\partial(q_1\ldots q_n p_1\ldots p_n)}{\partial(Q_1\ldots Q_n P_1\ldots P_n)}\right| = \left|\frac{\frac{\partial(q_1\ldots q_n p_1\ldots p_n)}{\partial(q_1\ldots q_n P_1\ldots P_n)}}{\frac{\partial(Q_1\ldots Q_n P_1\ldots P_n)}{\partial(q_1\ldots q_n P_1\ldots P_n)}}\right| = \left|\frac{\frac{\partial(p_1\ldots p_n)}{\partial(P_1\ldots P_n)}}{\frac{\partial(Q_1\ldots Q_n)}{\partial(q_1\ldots q_n)}}\right|. \tag{4.84}$$

Teniendo en cuenta que si la transformación canónica viene dada por la función generadora $F_2(\underline{q},\underline{P},t$ tenemos

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i &= \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \end{aligned} \tag{4.85}$$

con lo que

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_i}{\partial P_j} &= \frac{\partial^2 F_2}{\partial P_j \partial q_i} \\ \frac{\partial Q_i}{\partial q_j} i &= \frac{\partial^2 F_2}{\partial q_j \partial P_i}, \end{aligned} \tag{4.86}$$

con lo que, por el teorema de Schwarz,

$$\frac{\partial p_i}{\partial P_j} = \frac{\partial Q_j}{\partial q_i}, \tag{4.87}$$

y de aquí se sigue que

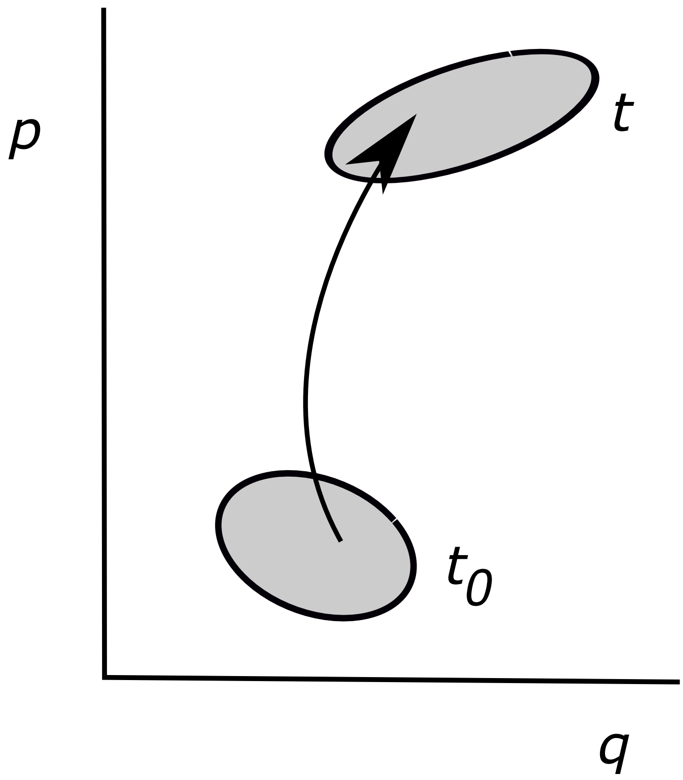

Figura 4.2: Teorema de Liouville.

$$\frac{\partial(p_1 \dots p_n)}{\partial(P_1 \dots P_n)} = \frac{\partial(Q_1 \dots Q_n)}{\partial(q_1 \dots q_n)} \quad \Rightarrow \quad \frac{\frac{\partial(p_1 \dots p_n)}{\partial(P_1 \dots P_n)}}{\frac{\partial(Q_1 \dots Q_n)}{\partial(q_1 \dots q_n)}} = 1. \tag{4.88}$$

Hemos demostrado, por tanto, que el volumen de una región de espacio fásico se conserva al realizar transformación es canónica. Esto es, si la transformación $(\underline{q}, \underline{p}) \to (\underline{Q}, \underline{P})$ es canónica entonces

$$\int \cdots \int \mathrm{d}q_1 \dots \mathrm{d}q_n \, \mathrm{d}p_1 \dots \mathrm{d}p_n = \int \cdots \int \mathrm{d}Q_1 \dots \mathrm{d}Q_n \, \mathrm{d}P_1 \dots \mathrm{d}P_n, \tag{4.89}$$

que será un invariante de Poincaré de orden $2n$.

Pasemos ahora a demostrar el teorema de Liouville. Ya hemos comentado que la evolución de un sistema hamiltoniano se puede considerar como una sucesión de transformaciones canónicas infinitesimales. La evolución en un tiempo finito también es una transformación canónica. Entonces, el volumen de una región dada del espacio fásico, al evolucionar el sistema, se mantendrá constante. Este resultado se conoce como teorema de Liouville.

Si $\mathcal{D}_0$ es una región y hay un número de puntos N_0, correspondientes a diferentes condiciones iniciales se tendrá que al evolucionar hasta el tiempo t pasarán a ocupar puntos en una región $\mathcal{D}_t$, con lo que el número de puntos debe ser igual a N_0. Como el volumen no ha cambiado se tiene que la densidad de puntos debe ser constante a lo largo de la evolución del sistema $\rho(t) = \rho(t_0)$, es decir

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = 0. \tag{4.90}$$

Como, en general se tiene que

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + [\rho, H], \tag{4.91}$$

se obtiene que

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -[\rho, H]. \tag{4.92}$$

El teorema de Liouville también puede verse como una ecuación de continuidad en un fluido: los puntos del espacio fásico forman un fluido que evoluciona. La velocidad de un punto del espacio fásico será la derivada respecto al tiempo de su posición

$$\vec{v} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n). \tag{4.93}$$

La ecuación de continuidad en un fluido nos dice que

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\rho + \rho\vec{\nabla}\cdot\vec{v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\rho\vec{\nabla}\cdot\vec{v}, \tag{4.94}$$

pero

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{v} = \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial p_1} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial p_2} + \cdots + \frac{\partial^2 H}{\partial q_n \partial p_n} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_1} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_2 \partial q_2} - \cdots - \frac{\partial^2 H}{\partial p_n \partial q_n} = 0 \tag{4.95}$$

y, de aquí,

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = 0. \tag{4.96}$$

El teorema de Liouville tiene una aplicación inmediata en mecánica estadística y de él se deduce que en situaciones de equilibrio estadístico, es decir cuando la densidad ρ no depende del tiempo, debemos tener $[\rho, H] = 0$, y esta situación se da cuando ρ es una función de la energía. Los colectivos microcanónico y canónico, estudiado en mecánica estadística, son claros ejemplos de situaciones de equilibrio estadístico.