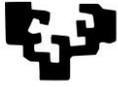


eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea



ZTF-FCT

Zientzia eta Teknologia Fakultatea
Facultad de Ciencia y Tecnología



Trabajo Fin de Grado
Grado en Física

Mecánica Hamiltoniana. Ecuación de Hamilton-Jacobi. Ejemplos y Aplicaciones

Autor:
Mikel Quintana Uriarte
Director:
Jesús Ibañez Medrano

Leioa, 27 de junio de 2013

Resumen:

En el marco de la mecánica clásica, se han estudiado las características de las transformaciones canónicas en el espacio de fases. El análisis de esta teoría ha permitido obtener la ecuación de Hamilton-Jacobi, una ecuación general de la mecánica, la cual permite abordar multitud de problemas. Para la comprensión de esta nueva teoría, se han analizado además varios ejemplos y aplicaciones prácticas.

Índice

1. Introducción	4
2. Mecánica Lagrangiana y Hamiltoniana	5
2.1. Formulación Lagrangiana	5
2.2. Formulación Hamiltoniana	9
3. Transformaciones Canónicas	13
3.1. Función generatriz	19
3.2. Familias de transformaciones canónicas continuas	21
4. Ecuación de Hamilton-Jacobi	24
4.1. Función característica de Hamilton	26
4.2. Variables de acción-ángulo	27
5. Ejemplos y Aplicaciones a la Teoría de Hamilton-Jacobi	28
5.1. Problema de fuerzas centrales	28
5.2. Átomo de Hidrógeno de Bohr-Sommerfeld	31
5.3. Obtención de la ecuación de Schrödinger	32
6. Conclusiones	35

1. Introducción

En la historia de la física, de entre tantos y tantos científicos de renombre, nadie cuestiona que Sir Isaac Newton (1643-1727)¹ destaca en múltiples aspectos. No solo sus increíbles aportaciones a la física, y en concreto a la mecánica, son las que le han llevado a tal nivel de admiración entre los físicos contemporáneos, sino el hecho de poder abarcar tan diversas áreas como la filosofía, química, matemáticas, óptica... Él fue capaz de esbozar y sintetizar el comportamiento clásico del movimiento de los cuerpos, dotando a la humanidad de nuevas herramientas para comprender el universo. No sólo eso, sus aportaciones a las matemáticas, junto con Gottfried Leibniz (1646-1716), entre otros, permitieron el desarrollo del cálculo infinitesimal como lo conocemos hoy día.

Uno de los ejercicios más complicados para los físicos a lo largo de la historia ha consistido en abstraer las cantidades y magnitudes físicas que determinan el comportamiento de los sistemas. En efecto, definir conceptos como la cantidad de movimiento o la fuerza, tal y como hizo Newton, partiendo de una base casi nula de conocimiento supone una ardua tarea. En este contexto, también ha de darse crédito a Joseph-Louis de Lagrange (1736-1813), William Rowan Hamilton (1805-1865) y Carl Gustav Jakob Jacobi (1804-1851), quienes con sus maneras alternativas de razonar consiguieron generalizar las leyes de Newton a nuevos principios, que permitían abordar el estudio de dichos sistemas de manera más general. Con sus aportaciones, el análisis de fuerzas quedó relegado a un segundo plano en pro de las energías y los potenciales.

El interés de este proyecto reside en estudiar tales teorías. En el primer capítulo repasamos las formulaciones de Lagrange y Hamilton, las cuales ya han sido abordadas a lo largo del grado. Estas teorías centran por primera vez el análisis de la dinámica en torno a la energía del sistema. Continuaremos introduciendo el concepto de la transformación canónica en el espacio de fases. Si bien se trata de un concepto físicamente abstracto, resulta fundamental en el desarrollo del objetivo final de este proyecto, que se analiza en el siguiente capítulo, y no es otro que obtener la ecuación de Hamilton-Jacobi. Dicha ecuación permite obtener, a todos los efectos, la transformación de coordenadas necesaria en el espacio de fases para que las ecuaciones del movimiento sea nulas.

Para comprender mejor su utilidad y generalidad, en el proyecto también analizamos una serie de ejemplos de diversa índole. En primer lugar, analizamos el comportamiento de una partícula en el seno de un potencial central e introducimos una pequeña perturbación, para comprobar sus efectos. En el siguiente ejemplo, dotamos a las ecuaciones resultantes del ejemplo anterior de un carácter cuántico. Ésto nos permitirá analizar la cuantización de Sommerfeld en el átomo de hidrógeno, obteniendo en última instancia la energía del estado fundamental. En el último ejemplo, como aplicación teórica, destacamos la importante relación que existe entre la ecuación de Hamilton-Jacobi y la ecuación de Schrödinger. Ello establece un nexo de unión entre la teoría clásica y la teoría cuántica.

¹Fechas datadas según el calendario gregoriano

2. Mecánica Lagrangiana y Hamiltoniana

En esta primera sección, nos proponemos realizar un repaso general a algunas de las características más importantes de las formulaciones lagrangiana y hamiltoniana. El correcto análisis de tales representaciones es necesario para desarrollos posteriores. Consideraremos desde un primer momento el caso más general al que podemos hacer referencia, es decir, un conjunto de partículas puntuales que pueden moverse por cualquier punto del espacio tridimensional.

2.1. Formulación Lagrangiana

La formulación lagrangiana se basa en la obtención de las ecuaciones del movimiento del sistema a partir de una función escalar, el lagrangiano, dependiente en primera instancia de las posiciones y de las velocidades de las partículas. Esta función, queda definida en el conocido como espacio de configuración.

Supongamos un sistema de N partículas puntuales con masas m_1, \dots, m_N . Las posiciones de tales masas con respecto a un sistema de referencia inercial vendrán dadas por los vectores $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$. Se denomina configuración del sistema a la posición de todas las partículas en un momento dado. Podemos definir así el espacio de configuración \mathcal{Q} como el conjunto de todas las configuraciones posibles del sistema. Este espacio de configuración, en ausencia de ligaduras, será un espacio euclídeo $3N$ -dimensional, \mathbb{E}^{3N} . Si el sistema tiene alguna ligadura, es decir, su movimiento está restringido por acción de alguna fuerza, entonces la curva del movimiento estará limitada a desplazarse por una determinada hipersuperficie de \mathbb{E}^{3N} . En este caso, $\mathcal{Q} \subset \mathbb{E}^{3N}$.

Esto puede entenderse fácilmente si consideramos, a modo de ejemplo, una única partícula desplazándose por una superficie, o una cuenta atravesando un alambre. En ambos casos, el movimiento queda restringido a el subespacio de \mathbb{E}^3 (el alambre y la superficie). Un punto cualquiera del espacio de configuración, el cual describe la posición de las N partículas en un momento dado, podrá describirse a través de las $3N$ coordenadas cartesianas.

$$x \equiv (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = (x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N) \quad (2.1)$$

No obstante, en general, nos será útil definir diferentes sistema de coordenadas $q \equiv (q^1, \dots, q^{3N})$ con $q^i = q^i(x, t)$ en el cual las coordenadas se adapten al movimiento de sistema según el problema en el que trabajemos. Estas coordenadas son conocidas como las coordenadas generalizadas del sistema. Es necesario considerar que para que el cambio de coordenadas sea invertible, el jacobiano tiene que ser distinto de cero.

$$\det \left(\frac{\partial q^j}{\partial r_k} \right) \neq 0 \quad (2.2)$$

En lo que sigue, consideraremos un espacio de configuración $3N$ dimensional con K ligaduras holónomas ². En estas condiciones el número de grados de libertad del sistema, o equivalentemente la dimensión del espacio de configuración, es $\alpha = 3N - K$. De este modo, definimos un conjunto $q = (q^1, \dots, q^\alpha)$ de coordenadas generalizadas.

²Ligaduras que limitan el número de configuraciones asequibles del sistema. En general, en un sistema con K ligaduras, éstas quedan descritas por funciones $f_A(x, t) = 0$ con $A = 1, \dots, K$.

En la mayoría de los casos, para sistemas con n grados de libertad, las fuerzas activas que sufre el sistema se derivan de un potencial $U(q, \dot{q}, t)$ ³. Hablamos entonces de la función lagrangiana del sistema como una función escalar de la forma:

$$L(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}, t) - U(q, \dot{q}, t) \quad (2.3)$$

Esta función desempeña un papel fundamental en la obtención de las ecuaciones del movimiento del sistema, como veremos a continuación, a través del conocido como Principio de Hamilton.

Principio de Hamilton

Consideremos el movimiento del sistema en el espacio de configuración con coordenadas generalizadas q . Supongamos que en un instante de tiempo inicial t_1 el sistema se encuentra en $q_1 = q(t_1)$. Igualmente, en cualquier instante de tiempo posterior t_2 , el sistema estará en $q_2 = q(t_2)$.

En el espacio de configuración, tomaremos una curva C dada por $q(t)$ y que pasa por q_1 y q_2 . En estas condiciones, definimos el funcional de acción de la curva C como una función integral

$$I[C] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (2.4)$$

El principio de Hamilton explica que de todas las curvas C compatibles con las características del problema, es decir, que pasan por q_1 y q_2 , la curva física que sigue el sistema es un extremo del funcional de acción. Para entender este principio es preciso estudiar el siguiente desarrollo. Consideramos que la familia de curvas depende de manera continua y diferenciable de un parámetro ϵ , talque $q(t, \epsilon)$. En otras palabras, el conjunto de todas las curvas que pasan por los puntos q_1 y q_2 . Tomaremos $\epsilon = 0$ para la curva física. Notamos que se requieren que

$$q(t_1, \epsilon) = q_1 \quad q(t_2, \epsilon) = q_2 \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial q^\alpha(t_1, \epsilon)}{\partial \epsilon} = \frac{\partial q^\alpha(t_2, \epsilon)}{\partial \epsilon} = 0 \quad (2.6)$$

De esta forma, la condición de extremal se puede expresar como una derivada con respecto a ϵ de la forma

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \left. \frac{d}{d\epsilon} \int_{t_1}^{t_2} L dt \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad (2.7)$$

Entonces, podremos realizar el siguiente desarrollo:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\epsilon} &= \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \epsilon} dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{\partial \dot{q}^\alpha}{\partial \epsilon} + \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right] dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{d}{dt} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} + \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right] dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} + \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right] dt = \\ &= \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) \right] \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} dt \end{aligned} \quad (2.8)$$

³En la inmensa mayoría de casos, los potenciales que se toman serán centrales e independientes del tiempo e incluso de la velocidad. No obstante, en el marco teórico, puede desarrollarse esta teoría sin hacer ninguna suposición previa a cerca de los mismos.

De esta última igualdad, el primer término se hace 0 por la condición (2.6). Al mismo tiempo, en $\epsilon = 0$ para que el resultado sea nulo, la única posibilidad es que, en el integrando, el factor dentro de los corchetes se haga 0:

$$\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) = 0 \quad (2.9)$$

Éstas son las ecuaciones de Euler-Lagrange. Son las n ecuaciones diferenciales de segundo orden, correspondientes a las ecuaciones del movimiento parametrizadas por el tiempo. Este método es válido para sistemas con ligaduras holónomas. Una manera equivalente de resolver el problema pasa por considerar un sistema de $3N$ coordenadas en el que las K ligaduras se aplican a través de multiplicadores de Lagrange⁴.

Es patente que, en esta descripción, las fuerzas quedan relegadas a un segundo plano con respecto a los potenciales. Consideremos ahora un sistema expresado en sus coordenadas cartesianas. En tal situación, para casos no relativistas, la energía cinética queda expresada como:

$$T_i = \frac{1}{2} m_i \dot{r}_i^2 \quad T(r_1, \dots, r_n) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i \dot{r}_i^2 \quad (2.10)$$

Introduciendo estas ecuaciones en (2.9) comprobamos que se recuperan las ecuaciones de Newton, de modo que puede reformularse la mecánica clásica a partir del principio de Hamilton.

Invariencias y simetrías, teorema de Noether

Resulta de especial interés analizar algunas características de los lagrangianos. Podemos comprobar cómo algunos pueden dar lugar a las mismas ecuaciones del movimiento. Supongamos dos lagrangianos $L(q, \dot{q}, t)$ y $L'(q, \dot{q}, t)$. Vemos fácilmente cómo ambos devolverán las mismas ecuaciones del movimiento si:

$$L'(q, \dot{q}, t) = cL(q, \dot{q}, t) + \frac{d\Lambda(q, t)}{dt} \quad (2.11)$$

Donde c es una constante arbitraria y $\Lambda(q, t)$ una función escalar. La equivalencia puede comprobarse de diversas formas⁵. Nosotros simplemente introduciremos (2.11) en la ecuación de Euler-Lagrange (2.9).

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) - \frac{\partial L'}{\partial q^\alpha} = c \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) - c \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{d\Lambda}{dt} \right) - \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \frac{d\Lambda}{dt} = 0 \quad (2.12)$$

Donde se ve que los dos últimos términos de la expresión se anulan. En general, el recíproco no es cierto, es decir, la existencia de dos Lagrangianos que aporten las mismas ecuaciones del movimiento no implica que éstos estén relacionados por (2.11). Evidentemente, este resultado es independiente del sistema de coordenadas escogido. En última instancia, este

⁴Se han de considerar $3N$ coordenadas e igualar las ecuaciones de Euler-Lagrange a la ligadura por el multiplicador. Éstas, junto con las propias ligaduras devuelven un sistema de $3N$ ecuaciones diferenciales.

⁵Puede introducirse el nuevo lagrangiano en el Principio de Hamilton y comprobar que se devuelven las mismas ecuaciones de Euler-Lagrange.

resultado será importante cuando se trate la función generatriz de la transformación canónica.

Dicho esto, a continuación, vamos a comprobar como puede haber cantidades constantes independientemente del sistema de coordenadas escogido. El estudio de estas cantidades y la obtención del denominado teorema de Noether resulta ser una de las principales fuentes de estudio de la física contemporánea.

Lo primero que debemos notar es que un Lagrangiano L' obtenido mediante una transformación de coordenadas $q \rightarrow q'$ verifica las mismas ecuaciones del movimiento.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}'^\alpha} - \frac{\partial L'}{\partial q'^\alpha} = 0 \quad (2.13)$$

Aunque evidente, este resultado es fundamental ya que indica que siempre se puede encontrar una transformación de coordenadas invertible que verifique las ecuaciones del movimiento en el espacio de configuración.

Por otra parte, el cambio de un sistema de coordenadas a otro puede expresarse en general a través de las siguientes expresiones.

$$q' = \mathcal{R}q \quad q = \mathcal{S}q' \quad (2.14)$$

La forma de \mathcal{R} y \mathcal{S} depende de las características de la transformación⁶. No obstante, para que la transformación sea invertible, se tiene que cumplir que la aplicación de ambos operadores devuelva la misma cantidad:

$$\mathcal{R}\mathcal{S} = \mathbb{1} \quad (2.15)$$

El hecho de que las ecuaciones de Euler-Lagrange sean invariantes bajo cualquier sistema de coordenadas nos permite tomar una familia de sistemas de coordenadas que dependen de manera continua y diferenciable de un parámetro ϵ . De este modo, la aplicación de $\mathcal{R}(\epsilon)$ sobre $q(t)$ devuelve una familia $q'(t, \epsilon)$ de coordenadas.

$$q'^\alpha = q'^\alpha(q, t, \epsilon), \quad q^\alpha = q^\alpha(q', t, \epsilon) \quad (2.16)$$

Sin pérdida de generalidad podemos asignar $\epsilon = 0$ a la transformación identidad, es decir, la transformación que devuelve el mismo sistema de coordenadas, de forma que:

$$\mathcal{R}(0) = \mathcal{S}(0) = \mathbb{1} \quad (2.17)$$

$$q'(t, 0) = \mathcal{R}(0)q(t) = q(t) \quad (2.18)$$

De esta forma, dos lagrangianos equivalentes se podrán expresar de la siguiente forma:

$$L(q, \dot{q}, t) = L_\epsilon(q', \dot{q}', t) = L_\epsilon \left(\mathcal{R}(\epsilon)q, \frac{d}{dt}[\mathcal{R}(\epsilon)q], t \right) \quad (2.19)$$

Si derivamos L_ϵ con respecto a ϵ obtendremos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_\epsilon}{\partial \epsilon} &= \frac{\partial L}{\partial q'^\alpha} \frac{\partial q'^\alpha}{\partial \epsilon} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'^\alpha} \frac{\partial \dot{q}'^\alpha}{\partial \epsilon} = \\ &= \left[\frac{\partial L}{\partial q'^\alpha} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}'^\alpha} \right) \right] \frac{\partial q'^\alpha}{\partial \epsilon} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}'^\alpha} \frac{\partial q'^\alpha}{\partial \epsilon} \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

⁶El estudio de esta teoría es independiente de la forma de las transformaciones. Éstas pueden ser tensoriales y no lineales. La característica que ha de cumplirse en todo caso es (2.15).

De esta última expresión, supongamos que $q(t)$ describe el movimiento real del sistema. Como tal, para $\epsilon = 0$ se tienen que cumplir las ecuaciones de Euler-Lagrange. Entonces, de manera directa:

$$\left. \frac{\partial L_\epsilon}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \left. \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right) \right|_{\epsilon=0} \quad (2.21)$$

Llegamos así a un resultado muy interesante. Si el lagrangiano transformado no depende del parámetro ϵ , entonces la derivada de dicho lagrangiano con respecto a esta variable se hará 0. Siguiendo la ecuación (2.21) eso significa que

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0} \quad (2.22)$$

es una cantidad conservada. Llegamos así al teorema de Noether: una cantidad conservada en un sistema corresponde a una simetría del lagrangiano. El recíproco también es cierto, es decir, una simetría implica la existencia de una cantidad conservada. Algunos de los ejemplos más relevantes son la invariancia bajo rotaciones, que genera la conservación del momento angular o la traslación temporal, que bajo determinadas circunstancias provoca la conservación de la energía. En este punto, resulta de manera casi natural definir el momento generalizado p_α como:

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \quad (2.23)$$

Trivialmente, de las ecuaciones de Euler-Lagrange, sabemos que:

$$\dot{p}_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \quad (2.24)$$

Si una coordenada q^α no aparece de manera explícita en el lagrangiano, su momento generalizado es una constante del movimiento. Este hecho se ve trivialmente a partir de (2.24). Entonces, a q^α se la llama coordenada cíclica. Los momentos generalizados constituyen un punto fundamental en el desarrollo de la formulación hamiltoniana, la cual analizaremos a continuación.

2.2. Formulación Hamiltoniana

Hasta ahora nos hemos dedicado a analizar los principios básicos detrás de la mecánica lagrangiana. Como ya hemos comentado, las ecuaciones de Euler-Lagrange aporta n ecuaciones diferenciales de segundo orden donde n es el número de coordenadas generalizadas (grados de libertad). La mecánica hamiltoniana surge al intentar buscar $2n$ ecuaciones diferenciales de primer orden equivalentes a las obtenidas por la mecánica lagrangiana que en algunos casos puedan llegar a simplificar nuestros problemas. Es preciso hacer notar, en cualquier caso, que la formulación hamiltoniana no constituye ninguna generalización con respecto a la lagrangiana y que en la mayoría de los casos, ambos métodos conducen a las mismas ecuaciones del movimiento. La forma de obtener dichas ecuaciones pasa por la obtención del hamiltoniano, una función escalar dependiente de las coordenadas q y de los momentos generalizados p , previamente mencionados.

Dado un lagrangiano $L(q^\alpha, \dot{q}^\alpha, t)$, nos interesa considerar las variables $p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}^\alpha$ en vez de las velocidades \dot{q}^α . Para ello se recurre a la transformada de Legendre del lagrangiano.

$$H(q, p, t) = \dot{q}^\alpha(q, p, t) p_\alpha - L(q, \dot{q}(q, p, t), t) \quad (2.25)$$

Las ecuaciones canónicas del movimiento que surgen de este proceso puede verse que serán las siguientes:

$$\dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q^\alpha}, \quad \dot{q}^\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \quad (2.26)$$

Vemos como la formulación hamiltoniana nos aporta un conjunto de $2n$ ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden. Las primeras n corresponden a la variación de las coordenadas q^α , mientras que el resto al de los momentos canónicos p_α .

De la transformada de Legendre se extrae otra relación igualmente relevante.

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.27)$$

Esta expresión advierte de que si el lagrangiano no es función explícita del tiempo, tampoco lo será el hamiltoniano. En otras palabras, H es una constante del movimiento si L es independiente del tiempo.

Ahora, es necesario destacar que para un lagrangiano de la forma $L = T - U$, donde U es un potencial generalizado que no depende explícitamente de \dot{q}^α , el hamiltoniano corresponderá a la energía total del sistema.

$$H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \dot{q}^\alpha - L = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^\alpha} \dot{q}^\alpha - (T - U) = T + U = E \quad (2.28)$$

El hecho de que con el hamiltoniano se obtenga solución para n coordenadas de posición y n coordenadas de momento hace que se defina de manera natural un nuevo espacio en el cual puede describirse el movimiento del sistema, el espacio de fases.

El espacio de fases y notación simpléctica

El espacio de fases es un espacio de $2n$ coordenadas (q, p) , el cual representaremos con la letra \mathcal{P} . Un punto en este espacio determina las posiciones y momentos de todas las partículas en un instante dado, es decir, el estado del sistema.

Es preciso marcar ciertas diferencias entre el espacio de configuración \mathcal{Q} y el espacio de fases \mathcal{P} . El espacio de configuración, describe la posición de todas las partículas en un único instante, quedando determinada su evolución a través del lagrangiano. El espacio de configuración no sólo informa de la posición de las partículas, sino que también informa de la dirección de su movimiento. Por cada punto en este espacio, sólo pasa una trayectoria. La evolución temporal de un sistema en el espacio de fases queda entonces determinada por el hamiltoniano, según (2.26).

Con intención de simplificar nuestra notación, vamos a designar a nuestras $2n$ coordenadas en el espacio de fases con la letra ξ de modo que:

$$\begin{aligned} \xi^\alpha &= q^\alpha, & \alpha &= 1, \dots, n \\ \xi^\alpha &= p_{\alpha-n}, & \alpha &= n+1, \dots, 2n \end{aligned} \quad (2.29)$$

Nótese que no se ha aplicado ninguna transformación, simplemente se ha normalizado la nomenclatura de q^α y p^α . A esta designación se la conoce como notación simpléctica y será la

que empleemos de ahora en adelante, salvo indicación previa. Se define la matriz simpléctica como:

$$\Gamma = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \mathbb{1} \\ \hline -\mathbb{1} & 0 \end{array} \right) = (\gamma^{\alpha\beta}) \quad (2.30)$$

Resulta inmediato comprobar que $\det[\Gamma] = 1$. Así, la matriz es invertible y puede verse que coincidirá con su traspuesta:

$$\Gamma^{-1} = \tilde{\Gamma} = \left(\begin{array}{c|c} 0 & -\mathbb{1} \\ \hline \mathbb{1} & 0 \end{array} \right) = (\gamma_{\alpha\beta}) \quad (2.31)$$

A través de esta definición podemos unificar las dos ecuaciones canónicas del movimiento en una, empleando esta notación⁷:

$$\gamma_{\alpha\beta} \dot{\xi}^\beta = \frac{\partial H}{\partial \xi^\alpha} \Leftrightarrow \dot{\xi}^\alpha = \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial \xi^\beta} \quad (2.32)$$

Puede comprobarse que ambas ecuaciones son totalmente equivalentes y que, expandidas devuelven (2.26). De este modo, un punto en el espacio de fases quedará descrito por sus $2n$ coordenadas ξ^α . Se define también la matriz Λ como:

$$\Lambda = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \mathbb{1} \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right) = (\lambda_{\alpha\beta}) \quad \Lambda^T - \Lambda = \tilde{\Gamma} \quad (2.33)$$

La cual nos permite tomar por separado las variables q^α ó p_α . En este punto, estamos preparados para considerar otro componente importante en la mecánica hamiltoniana, el corchete de Poisson.

Corchetes de Poisson

Consideremos dos variables dinámicas $F(\xi, t)$ y $G(\xi, t)$, es decir, dos cantidades dependientes de las coordenadas en el espacio de fases y el tiempo. Se define el corchete de Poisson como la operación:

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial \xi^\alpha} \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \xi^\beta} = \frac{\partial F}{\partial q^\alpha} \frac{\partial G}{\partial p^\alpha} - \frac{\partial F}{\partial p^\alpha} \frac{\partial G}{\partial q^\alpha} \quad (2.34)$$

Los corchetes de Poisson resultan ser un objeto de una importancia fundamental en el marco de la mecánica hamiltoniana. Por una parte, son cantidades que describen la evolución temporal de cualquier variable dinámica en el sistema, como veremos a continuación. Por otra parte, los corchetes de Poisson nos serán útiles a la hora de explicar las transformaciones canónicas. En este contexto, matemáticamente el corchete de Poisson traza de manera natural lo que se conoce como el álgebra de Poisson. Nosotros no nos inmiscuiremos en el análisis profundo de tal álgebra y nos centraremos en el interés físico del asunto.

Consideremos la variación con el tiempo de una determinada variable dinámica. Introduciendo las ecuaciones de hamilton en el siguiente desarrollo vemos que la variación total de una variable dinámica depende del corchete de Poisson.

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \xi^\alpha} \dot{\xi}^\alpha + \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial F}{\partial \xi^\beta} \frac{\partial H}{\partial \xi^\alpha} + \frac{\partial F}{\partial t} = [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (2.35)$$

⁷Desde este punto haremos uso del criterio de sumación de Einstein, salvo indicación explícita.

Como ya se ha introducido antes, la evolución temporal de cualquier variable dinámica, queda descrita a través del corchete. Particularmente, se puede introducir como variable dinámica $F = \xi^\alpha$. Llegamos de esta forma a que las ecuaciones canónicas del movimiento pueden reescribirse en términos del corchete de Poisson.

$$\dot{\xi}^\alpha = [\xi^\alpha, H] \quad (2.36)$$

En lo que sigue, será también necesario tener en cuenta una serie de propiedades algebraicas, las cuales enumeramos a continuación⁸:

- Linealidad: Siendo α y β dos constantes se cumple que $[\alpha F + \beta G, R] = \alpha[F, R] + \beta[G, R]$.
- Antisimetría: $[F, G] = -[G, F]$
- Regla del producto: $[F, GR] = [F, G]R + [F, R]G$
- Identidad de Jacobi: $[F, [G, R]] + [G, [R, F]] + [R, [F, G]] = 0$

Paralelamente, consideremos dos coordenadas cualesquiera del espacio de fases. Fácilmente se puede ver que:

$$[\xi^\alpha, \xi^\beta] = \gamma^{\alpha\beta} \quad (2.37)$$

Traducido a la notación de coordenadas de posición y de momento, las relaciones que se obtienen son⁹:

$$[q^\alpha, q^\beta] = [p_\alpha, p_\beta] = 0 \quad [q^\alpha, p_\beta] = \delta_\beta^\alpha \quad (2.38)$$

Ahora que ya hemos tomado nota de los puntos más relevantes de la teoría hamiltoniana, vamos a considerar el punto que da pie a la teoría de Hamilton-Jacobi y a desarrollos ulteriores, las transformaciones canónicas.

⁸Puntualizamos que tales propiedades están asociadas, además, al concepto matemático del álgebra de Poisson

⁹Los corchetes de Poisson están asociados a lo que en mecánica cuántica son los conmutadores. Las expresiones (2.38) guardan una estrecha relación con las reglas de conmutación de los operadores de posición y momento en el ámbito de la mecánica cuántica.

3. Transformaciones Canónicas

En la mecánica lagrangiana, los cambios de coordenadas invertibles en el espacio de configuración están siempre permitidos. Este hecho deriva en la obtención de lagrangianos equivalentes que en última instancia aportan las mismas ecuaciones del movimiento. En analogía a este análisis es preciso comprobar si son igualmente posibles transformaciones en el espacio de fases a través de las ecuaciones de la mecánica hamiltoniana. Se verá que, en este caso, una transformación de coordenadas en el espacio de fases que mantenga la forma de las ecuaciones del movimiento, sólo será posible bajo determinadas circunstancias.

Definamos un hamiltoniano descrito por $H(\xi, t)$, siendo ξ^α las coordenadas en el espacio de fases. Consideremos además un nuevo conjunto de coordenadas $\eta^\alpha(\xi, t)$ invertible. Es preciso aclarar que un cambio de coordenadas en el espacio de fases constituye un cambio más general que en el espacio de configuración, ya que no sólo se cambian las coordenadas espaciales, sino que también se cambian los momentos correspondientes, pudiendo generarse nuevas coordenadas η^α dependientes tanto de las coordenadas de posición como de las de momento iniciales. En caso de existir, un nuevo hamiltoniano $K(\eta, t)$ satisfaría:

$$\dot{\eta}^\alpha = \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial K}{\partial \eta^\beta} \quad (3.1)$$

Es sencillo comprobar a través de casos particulares que, en general, el nuevo hamiltoniano K no siempre existe. Supongamos el caso de una partícula con un único grado de libertad para el cual conocemos las curvas solución del movimiento en el espacio de fases $\xi^\alpha(t)$ con $\alpha = 1, 2$. Si ahora expresamos esta solución en otro conjunto de coordenadas $\eta^\alpha(\xi, t)$, en general se tendría que cumplir que:

$$\dot{\eta}^1 = \frac{\partial K}{\partial \eta^2} = f(\eta^1, \eta^2) \quad - \quad \dot{\eta}^2 = \frac{\partial K}{\partial \eta^1} = g(\eta^1, \eta^2) \quad (3.2)$$

Para obtener el nuevo hamiltoniano de esta forma se tienen que verificar las condiciones de integrabilidad, lo cual no será posible en general. Vemos entonces que el nuevo hamiltoniano existe si:

$$\frac{\partial^2 K}{\partial \eta^1 \partial \eta^2} = \frac{\partial^2 K}{\partial \eta^2 \partial \eta^1} \quad (3.3)$$

Se dice que una transformación es **canonoide** si para un hamiltoniano H dado, existe otro hamiltoniano K determinado por las coordenadas transformadas. Asimismo, la transformación será **canónica** si existe un nuevo K para cualquier H . Efectivamente, una transformación canónica es siempre canonoide pero el inverso no es en general cierto. La determinación de transformaciones canónicas será entonces necesaria, para ampliar nuestra perspectiva sobre el espacio de fases.

Consideremos, pues, una transformación arbitraria $\eta^\alpha = \eta^\alpha(\xi, t)$. El corchete de Poisson de dos variables dinámicas R y S está relacionado en ambos sistemas de coordenadas a través de:

$$[R, S]^\xi = \frac{\partial R}{\partial \xi^\rho} \gamma^{\rho\sigma} \frac{\partial S}{\partial \xi^\sigma} = \frac{\partial R}{\partial \eta^\alpha} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\rho} \gamma^{\rho\sigma} \frac{\partial S}{\partial \eta^\beta} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\sigma} = \frac{\partial R}{\partial \eta^\alpha} [\eta^\alpha, \eta^\beta] \frac{\partial S}{\partial \eta^\beta} \quad (3.4)$$

Con intención de especificar, denotamos como $[R, S]^\xi$ al corchete de Poisson con respecto al conjunto de coordenadas inicial. En estas condiciones, estamos en disposición de probar cuáles son las condiciones que tiene que cumplir $\eta(\xi, t)$ para que sea canónica a través de los siguientes teoremas.

Teorema del corchete de Poisson.

Sean $\xi^\alpha(t)$ un conjunto de curvas en el espacio de fases, este conjunto representará el movimiento del sistema de un hamiltoniano $H(\xi, t)$ si y sólo si, para cualquier par de variables dinámicas $R(\xi, t)$ y $S(\xi, t)$ se verifica que:

$$\frac{d}{dt}[R, S] = \left[\frac{dR}{dt}, S \right] + \left[R, \frac{dS}{dt} \right] \quad (3.5)$$

DEMOSTRACIÓN:

En primer lugar, si el movimiento del sistema está gobernado por $H(\xi, t)$ entonces tiene que cumplirse que la derivada total con respecto al tiempo del corchete de dos variables R y S sea:

$$\frac{d}{dt}[R, S] = [[R, S], H] + \frac{\partial}{\partial t}[R, S] = [[R, H], S] + [R, [S, H]] + \frac{\partial}{\partial t}[R, S] \quad (3.6)$$

Donde se ha empleado la identidad de Jacobi y la antisimetría de los corchetes. Simultáneamente, la derivada parcial del corchete con respecto al tiempo puede calcularse como:

$$\frac{\partial}{\partial t}[R, S] = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial R}{\xi^\alpha} \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial S}{\partial \xi^\beta} \right) = \frac{\partial^2 R}{\partial \xi^\alpha \partial t} \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial S}{\partial \xi^\beta} + \frac{\partial R}{\partial \xi^\alpha} \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^\beta \partial t} = \left[\frac{\partial R}{\partial t}, S \right] + \left[R, \frac{\partial S}{\partial t} \right] \quad (3.7)$$

Si introducimos (3.7) en (3.6):

$$\frac{d}{dt}[R, S] = \left[[R, H] + \frac{\partial R}{\partial t}, S \right] + \left[R, [S, H] + \frac{\partial S}{\partial t} \right] = \left[\frac{dR}{dt}, S \right] + \left[R, \frac{dS}{dt} \right] \quad (3.8)$$

Por tanto, queda probado que esta es una condición necesaria, pero no suficiente. Para probar que es condición suficiente, partiremos de que se verifica la condición (3.5). Entonces, tomando $R = \xi^\alpha$ y $S = \xi^\beta$:

$$\frac{d}{dt}[\xi^\alpha, \xi^\beta] = \frac{d}{dt} \gamma^{\alpha\beta} = 0 = [\dot{\xi}^\alpha, \xi^\beta] + [\xi^\alpha, \dot{\xi}^\beta] \quad (3.9)$$

Consideremos en estas circunstancias que $\dot{\xi}^\alpha = f^\alpha(\xi, t)$ una función determinada. Entonces la expresión anterior se reescribe como:

$$0 = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \xi^\mu} \gamma^{\mu\nu} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \xi^\nu} + \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \xi^\mu} \gamma^{\mu\nu} \frac{\partial f^\beta}{\partial \xi^\nu} = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \xi^\mu} \gamma^{\mu\beta} + \gamma^{\alpha\nu} \frac{\partial f^\beta}{\partial \xi^\mu} \quad (3.10)$$

Donde obviamente se ha aplicado que:

$$\frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \xi^\beta} = \delta_\beta^\alpha \quad \gamma^{\alpha\beta} \delta_\beta^\mu = \gamma^{\alpha\mu} \quad (3.11)$$

Entonces podemos multiplicar (3.10) por $\gamma_{\alpha\rho} \gamma_{\beta\sigma}$ (bajar índices en la expresión):

$$0 = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \xi^\mu} \gamma^{\mu\beta} \gamma_{\alpha\rho} \gamma_{\beta\sigma} + \gamma_{\alpha\rho} \gamma_{\beta\sigma} \gamma^{\alpha\nu} \frac{\partial f^\beta}{\partial \xi^\mu} = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \xi^\sigma} \gamma_{\alpha\rho} - \gamma_{\beta\sigma} \frac{\partial f^\beta}{\partial \xi^\rho} \quad (3.12)$$

Paralelamente, la obtención del hamiltoniano por integración requiere el cumplimiento de las condiciones de integrabilidad. Así, derivando las ecuaciones canónicas del movimiento con respecto a ξ^σ , comprobamos que:

$$\frac{\partial H}{\partial \xi^\beta} = \gamma_{\beta\alpha} \dot{\xi}^\alpha = \gamma_{\beta\alpha} f^\alpha \quad (3.13)$$

$$0 = \frac{\partial^2 H}{\partial \xi^\rho \partial \xi^\sigma} - \frac{\partial^2 H}{\partial \xi^\sigma \partial \xi^\rho} = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \xi^\sigma} \gamma_{\alpha\rho} - \gamma_{\beta\sigma} \frac{\partial f^\beta}{\partial \xi^\rho} \quad (3.14)$$

Por tanto, como (3.12) y (3.14) son idénticas queda totalmente probado que el cumplimiento de la expresión (3.5) es condición necesaria y suficiente para que las coordenadas ξ^α sean las curvas solución del movimiento del Hamiltoniano $H(\xi, t)$. A continuación, asociado a este teorema demostraremos el teorema de la transformación canónica.

Teorema de la transformación canónica.

Sean R y S dos variables dinámicas dependientes de las coordenadas en el espacio de fases ξ^α y el tiempo, consideremos una transformación de coordenadas invertible $\eta(\xi, t)$. Entonces las siguientes tres afirmaciones son equivalentes:

1. La transformación es canónica.

2. Se verifica que

$$[R, S]^\eta = \lambda [R, S]^\xi \quad \text{con} \quad \lambda \neq 0 \quad (3.15)$$

3. La transformación es canonoide con respecto a hamiltonianos de la forma:

$$H = c + c_\alpha \xi^\alpha + \frac{1}{2} c_{\alpha\beta} \xi^\alpha \xi^\beta \quad \text{con} \quad c, c_\alpha, c_{\alpha\beta} \quad \text{constantes} \quad (3.16)$$

DEMOSTRACIÓN:

1. \Rightarrow 3. Se verifica trivialmente por definición que si una transformación es canónica, lo es para cualquier hamiltoniano H .

2. \Rightarrow 1. Es fácil ver que si se cumple (3.5), entonces:

$$\frac{d}{dt} [R, S]^\eta = \lambda \frac{d}{dt} [R, S]^\xi = \lambda \left(\left[\frac{dR}{dt}, S \right]^\xi + \left[R, \frac{dS}{dt} \right]^\xi \right) = \left[\frac{dR}{dt}, S \right]^\eta + \left[R, \frac{dS}{dt} \right]^\eta \quad (3.17)$$

Como se cumple para cualquier $H(\xi, t)$, la transformación es canónica.

3. \Rightarrow 2. Procederemos a esta demostración por partes. En primer lugar consideremos $c_\alpha = c_{\alpha\beta} = 0$, es decir, $H=c$. En estas circunstancias, las ecuaciones del movimiento son $\dot{\xi}^\alpha = 0$. Pero por hipótesis la transformación ha de ser canonoide. Esto implica que $\eta^\alpha(t)$ deriva de un hamiltoniano y, en consecuencia tiene que cumplirse que:

$$\frac{d}{dt} [\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta = \left[\dot{\xi}^\alpha, \xi^\beta \right]^\eta + \left[\xi^\alpha, \dot{\xi}^\beta \right]^\eta = 0 \quad (3.18)$$

Por otra parte, la transformación es invertible. En consecuencia, podemos definir:

$$[\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta = f^{\alpha\beta}(\xi, t) \quad (3.19)$$

Las funciones $f^{\alpha\beta}$ dependen únicamente de la forma de la transformación y no del tipo de hamiltoniano. Por tanto, consideraremos la demostración a través de casos particulares de tales H . Como ya habíamos adelantado, si $H = c$, entonces:

$$0 = \frac{df^{\alpha\beta}}{dt} = [f^{\alpha\beta}, H]^\xi + \frac{\partial f^{\alpha\beta}}{\partial t} \quad (3.20)$$

Es decir, como $[f^{\alpha\beta}, H]^\xi = 0$, las funciones $f^{\alpha\beta}$ no dependen explícitamente de t .

Consideremos ahora $c = c_{\alpha\beta} = 0$, es decir $H = c_\alpha \xi^\alpha$. Las ecuaciones del movimiento serán $\dot{\xi}^\alpha = \gamma^{\alpha\beta} c_\beta$. Si procedemos como en el caso anterior:

$$0 = \frac{df^{\alpha\beta}}{dt} = [f^{\alpha\beta}, H]^\xi + \frac{\partial f^{\alpha\beta}}{\partial t} = [f^{\alpha\beta}, c_\rho \xi^\rho]^\xi = \frac{\partial f^{\alpha\beta}}{\partial \xi^\sigma} \gamma^{\sigma\nu} c_\nu \quad (3.21)$$

Pero como c_α son constantes arbitrarias, se ve fácilmente que las funciones $f^{\alpha\beta}$ tampoco dependen de ξ^α , es decir, son constantes.

Por último, vamos a considerar el caso $c = c_\alpha = 0$. Ahora $H = c_{\alpha\beta} \xi^\alpha \xi^\beta / 2$ y, en consecuencia las ecuaciones del movimiento son $\dot{\xi}^\alpha = \gamma^{\alpha\beta} c_{\beta\rho} \xi^\rho$. Si repetimos el proceso:

$$\frac{d}{dt} [\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta = \frac{df^{\alpha\beta}}{dt} = 0 = \gamma^{\alpha\rho} c_{\rho\sigma} [\xi^\sigma, \xi^\beta]^\eta + \gamma^{\beta\rho} c_{\rho\sigma} [\xi^\alpha, \xi^\sigma]^\eta \quad (3.22)$$

Donde ahora el último término de la expresión anterior se puede escribir como:

$$0 = \gamma^{\alpha\rho} c_{\rho\sigma} f^{\sigma\beta} + f^{\alpha\sigma} \gamma^{\beta\rho} c_{\rho\sigma} \quad (3.23)$$

Si se considera un análisis matricial de esta expresión, con $F = f^{\alpha\beta}$ y $C = c_{\alpha\beta}$:

$$\Gamma C F = F C \Gamma \quad \Rightarrow \quad C F \Gamma = \Gamma F C \quad (3.24)$$

Si tomamos el caso en el que $C=1$, entonces $F\Gamma$ es una matriz simétrica. Por tanto, a través de (3.24), vemos que ésta es una matriz simétrica que conmuta con toda matriz C . Se puede probar que si una matriz simétrica conmuta con todas las matrices simétricas, entonces debe ser múltiplo de la unidad. De modo que

$$F\Gamma = -\lambda \mathbb{1} \quad \Rightarrow \quad F = \lambda \Gamma \quad \text{y entonces} \quad f^{\alpha\beta} = [\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta = \lambda \gamma^{\alpha\beta} \quad (3.25)$$

Así, para dos variables dinámicas, vemos que:

$$[R, S]^\eta = \frac{\partial R}{\partial \xi^\rho} [\xi^\rho, \xi^\sigma]^\eta \frac{\partial S}{\partial \xi^\sigma} = \lambda [R, S]^\xi \quad (3.26)$$

Quedando así el teorema completamente demostrado, ya que cualquier afirmación es equivalente a las demás. La importancia de estos teoremas reside en que aportan una manera general de determinar si una transformación en el espacio de fases es canónica.

Consideremos dos variables dinámicas R y S en un conjunto de coordenadas ξ^α y en el espacio transformado η^α . Ya se ha visto previamente que el corchete de Poisson en ambos sistemas está relacionado por (3.4).

$$[R, S]^\eta = \frac{\partial R}{\partial \xi^\alpha} [\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta \frac{\partial S}{\partial \xi^\beta}$$

Pero para que una transformación sea canónica, se ha visto que tiene que cumplirse que:

$$[R, S]^\eta = \lambda [R, S]^\xi \quad (3.27)$$

Siendo λ una constante multiplicativa. Juntando las dos últimas expresiones obtenemos que de manera totalmente general, para que una transformación sea canónica, tiene que cumplirse que:

$$[\xi^\alpha, \xi^\beta]^\eta = \lambda \gamma^{\alpha\beta} \quad (3.28)$$

La constante λ puede ser absorbida por la propia transformación con un simple cambio de escala, de forma que sin pérdida de generalidad, podemos considerar $\lambda = 1$. Algunos textos hablan de *transformación canónica extensa* para los casos en que $\lambda \neq 1$. En cualquier caso, queda patente que una transformación canónica es aquella en la que la matriz jacobiana deja invariante a la matriz simpléctica.

Es preciso marcar paralelamente el interés algebraico de las transformaciones canónicas. Éstas forman grupo, conocido como grupo simpléctico $\text{Sp}(2n)$ de $2n$ dimensiones. Por definición, un grupo cumple las siguientes características:

- Para un par de elementos $a, b \in G$, el producto $a \cdot b$ es otro elemento del grupo. En nuestro caso, la aplicación sucesiva de dos transformaciones canónicas, sigue siendo canónica.
- Existe un elemento neutro $\mathbb{1} \in G$ tal que $\mathbb{1} \cdot a = a$. En la analogía, el elemento neutro es la transformación identidad, ya que se trata de un elemento que devuelve las mismas coordenadas.
- Todo elemento $a \in G$ tiene un elemento inverso $b \in G$ tal que $a \cdot b = \mathbb{1}$. En el caso de las transformaciones canónicas, una transformación inversa sigue siendo una transformación canónica. La aplicación de una transformación y su inversa es equivalente a aplicar la transformación identidad.
- Se cumple la propiedad asociativa, es decir, $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ para $a, b, c \in G$. Trivialmente, esto es cierto para las transformaciones canónicas.

El interés algebraico de estas estructuras radica en que, en general, un grupo de simetría codifica dichas simetrías en un sistema. Más adelante comprobaremos que al dotar a las transformaciones de un carácter continuo se forman los conocidos como grupos de Lie.

Corchetes de Lagrange

La caracterización de las transformaciones canónicas a través de los corchetes de Poisson no es única. A continuación, vamos a explicar el concepto del corchete de Lagrange y su relación con el de Poisson. Veremos a través de este elemento cómo toda transformación canónica tiene asociada una función, conocida como función generatriz, que será de vital importancia en la teoría de Hamilton-Jacobi.

Consideremos, una vez más, un conjunto de coordenadas η^α en el espacio de fases. Se define el corchete de Lagrange de dos cantidades (u, v) como:¹⁰

¹⁰Nótese que al derivar con respecto a (u, v) , no hablamos de variables dinámicas, sino simplemente de cantidades.

$$\{u, v\}^\eta = \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial u} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial v} \quad (3.29)$$

Es trivial comprobar que el corchete de Lagrange es antisimétrico:

$$\{u, v\}^\eta = -\{v, u\}^\eta \quad (3.30)$$

Tomemos, por otra parte, otro conjunto de coordenadas ξ^α . La relación entre ambos sistemas a través del corchete de Lagrange es:

$$\{\xi_\mu, \xi_\nu\}^\eta = \gamma_{\alpha,\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\mu} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\nu} \quad \text{con} \quad \xi_\mu = \delta_{\mu\rho} \xi^\rho \quad (3.31)$$

Puede interpretarse que el corchete de Lagrange de las variables ξ^α con respecto a las η^α constituye la operación inversa a los corchetes de Poisson.

$$\begin{aligned} \{\xi_\nu, \xi_\mu\}^\eta [\xi^\mu, \xi^\rho]^\eta &= \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\nu} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\mu} \frac{\partial \xi^\mu}{\partial \eta^\sigma} \frac{\partial \xi^\rho}{\partial \eta^\tau} \gamma^{\sigma\tau} = \\ &= \delta_\sigma^\beta \gamma_{\alpha\beta} \gamma^{\sigma\tau} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\nu} \frac{\partial \xi^\rho}{\partial \eta^\tau} = \\ &= \delta_\alpha^\tau \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\nu} \frac{\partial \xi^\rho}{\partial \eta^\tau} = \frac{\partial \eta^\tau}{\partial \xi^\nu} \frac{\partial \xi^\rho}{\partial \eta^\tau} = \delta_\nu^\rho \end{aligned} \quad (3.32)$$

Este resultado nos permite probar de manera sencilla la condición precisa para que una transformación sea canónica, a través del corchete de Lagrange.

Teorema del corchete de Lagrange:

La condición necesaria y suficiente para que una transformación de coordenadas $\eta(\xi, t)$ sea canónica es que:

$$\{\xi_\alpha, \xi_\beta\}^\eta = \gamma_{\alpha\beta} \quad (3.33)$$

DEMOSTRACIÓN:

Es bien sabido que la condición necesaria y suficiente para que una transformación sea canónica es que:

$$[\xi^\beta, \xi^\mu]^\eta = \gamma^{\beta\mu} \quad (3.34)$$

Pero según el resultado obtenido en (3.32), el corchete de Poisson es el inverso al de Lagrange, de manera que:

$$\begin{aligned} \{\xi_\alpha, \xi_\beta\}^\eta [\xi^\beta, \xi^\mu]^\eta &= \delta_\alpha^\mu \\ \{\xi_\alpha, \xi_\beta\}^\eta \gamma^{\beta\mu} &= \delta_\alpha^\mu \\ \{\xi_\alpha, \xi_\beta\}^\eta &= \gamma_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Como la condición suficiente se demuestra de la misma manera, el teorema esta totalmente probado. El corchete de Lagrange nos será útil para hablar de las funciones generatrices asociadas a las transformaciones canónicas.

3.1. Función generatriz

Ya se han considerado un par de métodos para determinar si una transformación es canónica en el espacio de fases. No obstante, no debemos desviarnos de nuestro principal objetivo, a saber, determinar el nuevo hamiltoniano $K(\eta, t)$ en el nuevo conjunto de coordenadas. Vamos a estudiar a continuación que para cada transformación canónica hay asociada una función, conocida como función generatriz, que nos permitirá establecer la relación entre ambos hamiltonianos.

El objetivo es construir la dicha función. Consideremos la ya habitual transformación de coordenadas $\eta(\xi, t)$ invertible. Vamos a estudiar la cantidad:

$$\Omega = \lambda_{\mu\nu} \dot{\xi}^\mu \xi^\nu - \lambda_{\mu\nu} \dot{\eta}^\mu \eta^\nu = \lambda_{\mu\nu} (\dot{\xi}^\mu \xi^\nu - \dot{\eta}^\mu \eta^\nu) \quad (3.36)$$

Intentemos escribir esta cantidad en términos de $\dot{\xi}^\alpha$ y ξ^α . Notamos que

$$\dot{\eta}^\alpha = \left(\frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\mu} \right) \dot{\xi}^\mu + \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} \Leftrightarrow \dot{\xi}^\mu = \frac{\partial \xi^\mu}{\partial \eta^\tau} \left(\dot{\eta}^\tau - \frac{\partial \eta^\tau}{\partial t} \right) \quad (3.37)$$

Entonces la ecuación (3.36) puede reescribirse en términos de dos cantidades que llamaremos φ_μ y ψ .

$$\varphi_\mu = \lambda_{\mu\nu} \xi^\nu - \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\mu} \eta^\beta \quad \psi = -\lambda_{\mu\nu} \frac{\partial \eta^\mu}{\partial t} \eta^\nu \quad (3.38)$$

$$\Omega = \varphi_\mu \dot{\xi}^\mu + \psi \quad (3.39)$$

Si diferenciamos la cantidad φ_μ , llegaremos a que es una cantidad dependiente del corchete de Lagrange.

$$\frac{\partial \varphi_\mu}{\partial \xi^\nu} - \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial \xi^\mu} = \gamma_{\mu\nu} - \{\xi^\mu, \xi^\nu\}^\nu \quad (3.40)$$

Pero según el teorema del corchete de Lagrange, si se cumple que la transformación es canónica, la parte de la izquierda de la expresión anterior se tiene que anular. Esto nos permite caracterizar φ_μ como la derivada parcial de una función escalar, que será la función generatriz:

$$\frac{\partial \varphi_\mu}{\partial \xi^\nu} - \frac{\partial \varphi_\nu}{\partial \xi^\mu} = 0 \Rightarrow \varphi_\mu = \frac{\partial F}{\partial \xi^\mu} \quad (3.41)$$

Diferenciamos, por otra parte, φ_μ y ψ de la manera siguiente:

$$\frac{\partial \varphi_\mu}{\partial t} - \frac{\partial \psi}{\partial \xi_\mu} = \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi_\mu} \quad (3.42)$$

Se tienen que cumplir las ecuaciones canónicas del movimiento tanto para $H(\xi, t)$ como para $K(\eta, t)$ en sus respectivos sistemas de coordenadas. Pero al mismo tiempo, conocemos cuál va a ser la variación con el tiempo de $\dot{\eta}^\alpha$.

$$\dot{\eta}^\alpha = \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\rho} \dot{\xi}^\rho + \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} = \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\rho} \gamma_{\rho\lambda} \frac{\partial H}{\partial \xi^\lambda} + \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} \quad (3.43)$$

Despejando la derivada parcial de η^α e introduciéndola en (3.42) llegaremos al siguiente resultado:

$$\frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\mu} = -\frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\rho} \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\mu} \gamma_{\rho\lambda} \frac{\partial H}{\partial \xi^\lambda} = \gamma_{\alpha\lambda} \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \xi^\mu} \frac{\partial H}{\partial \eta^\lambda} = \frac{\partial}{\partial \xi^\mu} (-H + K) \quad (3.44)$$

De manera que si introducimos (3.44) en (3.42) y tenemos en cuenta (3.41), entonces obtendremos que:

$$0 = \frac{\partial}{\partial \xi^\mu} [\psi - H + K] - \frac{\partial \varphi^\mu}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi^\mu} \left[\psi - H + K - \frac{\partial F}{\partial t} \right] \quad (3.45)$$

Lo que se ha logrado con este proceso es determinar las derivadas parciales de $F(\xi, t)$:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi^\mu} = \lambda_{\mu\beta} \xi^\beta - \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial \xi^\mu} \eta^\beta \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \eta^\alpha}{\partial t} \eta^\beta - H + K \quad (3.47)$$

El término dentro de los corchetes en (3.45) depende únicamente del tiempo. Simultáneamente, la expresión en (3.41) determina F salvo una función $f(t)$ aditiva. Esta función puede elegirse para que:

$$\psi - H + K = \frac{\partial F}{\partial t} \quad (3.48)$$

De manera que la función $F(\xi, t)$ queda totalmente determinada por (3.48) y (3.41).

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \xi^\mu} \dot{\xi}^\mu + \frac{\partial F}{\partial t} = \lambda_{\alpha\beta} \left(\dot{\xi}^\alpha \xi^\beta - \dot{\eta}^\alpha \eta^\beta \right) - H(\xi, t) + K(\eta, t) \quad (3.49)$$

Se aprecia que la derivada total con respecto al tiempo de F depende de los dos hamiltonianos y de la cantidad Ω con la que hemos comenzado el desarrollo. A simple vista puede detectarse su utilidad. Por una parte, a partir de ella, la obtención del nuevo hamiltoniano K resulta trivial. Por otra parte, dada una función generatriz, puede estudiarse la transformación canónica $\eta(\xi, t)$ asociada a ella. Pero es preciso notar que a una única función generatriz, le pueden corresponder diversas transformaciones canónicas.

Resulta interesante expresar la ecuación (3.49) en la nomenclatura tradicional, siendo (q, p) las coordenadas en el espacio inicial y (Q, P) las coordenadas en el espacio transformado. Tras las cuentas pertinentes, vemos que:

$$(\dot{q}^\mu p_\mu - H) - (\dot{Q}^\mu P_\mu - K) = \frac{dF}{dt} \quad (3.50)$$

Pero esto no es más que la diferencia de los lagrangianos en ambos sistemas de coordenadas.

$$L(q, \dot{q}, t) - L'(Q, \dot{Q}, t) = \frac{dF}{dt} \quad (3.51)$$

Lo que implícitamente muestra esta última ecuación es que lagrangianos expresados en diferentes sistemas de coordenadas difieren únicamente en la derivada total de una función que, como se explicó anteriormente, no interviene en el movimiento del sistema.¹¹

Tipos de transformaciones canónicas

Las transformaciones canónicas se pueden agrupar según cuáles de las coordenadas (q, p, Q, P) son independientes entre sí. Este hecho da lugar a cuatro tipos diferentes de transformaciones con sus correspondientes funciones generatrices F .

¹¹Una forma alternativa de ver esto es a través del Principio de Hamilton Modificado. Si se verifica este principio para uno de los lagrangianos, automáticamente se verifica para cualquier otro.

Se dice que una transformación canónica es de **tipo I** si las cantidades (q, Q) son independientes entre sí. Esto quiere decir que las coordenadas p_α y P_α se pueden escribir en términos de las dos anteriores y el tiempo.

$$p_\alpha = \tilde{p}_\alpha(q, Q, t) \quad P_\alpha = \tilde{P}_\alpha(q, Q, t) \quad (3.52)$$

La función generatriz de este tipo, la denotaremos como F^1 , que no es más que la misma función generatriz expresada en términos de (q, Q) .

$$F(q, p, t) = F(q, \tilde{p}(q, Q, t), t) = F^1(q, Q, t) \quad (3.53)$$

A través de un análisis relativamente sencillo, podemos comprobar que (3.49) se puede expresar de una manera simplificada en términos, únicamente, de H , K y F^1 .

$$K = H + \frac{\partial F^1}{\partial t} \quad (3.54)$$

Además también pueden obtenerse p_α y P_α como:

$$\frac{\partial F^1}{\partial q^\alpha} = p_\alpha \quad \frac{\partial F^1}{\partial Q^\alpha} = -P_\alpha \quad (3.55)$$

Uno puede repetir el mismo proceso para cualquier combinación de parejas de coordenadas independientes. Las transformaciones canónicas de **tipo II** son aquellas para las que (q, P) son las coordenadas independientes. En este caso,

$$Q^\alpha = \tilde{Q}^\alpha(q, P, t) \quad p_\alpha = \tilde{p}_\alpha(q, P, t) \quad F^2(q, P, t) = F(q, \tilde{p}(q, P, t), t) + Q^\alpha P_\alpha \quad (3.56)$$

Nótese que en este caso, Q^α introducido en F^2 es función de las coordenadas q y P . No obstante, puede verse que ahora F^2 representa la transformada de Legendre de F^1 . De manera directa, puede llegarse a que:

$$p_\alpha = \frac{\partial F^2}{\partial q^\alpha} \quad Q^\alpha = \frac{\partial F^2}{\partial P_\alpha} \quad K = H + \frac{\partial F^2}{\partial t} \quad (3.57)$$

Pueden seguirse procesos equivalentes para las transformaciones de **tipo III**, cuyas variables independientes son (p, Q) , y **tipo IV**, cuyas variables independientes son (p, P) . Para las de tipo III,

$$q^\alpha = -\frac{\partial F^3}{\partial p_\alpha} \quad P_\alpha = -\frac{\partial F^3}{\partial Q^\alpha} \quad K = H + \frac{\partial F^3}{\partial t} \quad (3.58)$$

Y, para las de tipo IV,

$$q^\alpha = -\frac{\partial F^4}{\partial p_\alpha} \quad Q^\alpha = \frac{\partial F^4}{\partial P_\alpha} \quad K = H + \frac{\partial F^4}{\partial t} \quad (3.59)$$

Con todo, cabe destacar que estos no son más que casos particulares de transformaciones canónicas. Puede darse la situación de que una transformación no pertenezca a ninguno de estos tipos, o bien pertenezca a varios. En cualquier caso, es patente que los cálculos en estas situaciones se simplifican notoriamente.

3.2. Familias de transformaciones canónicas continuas

Vamos a concluir nuestro análisis de las transformaciones canónicas realizando una pequeña aunque importante extensión, la cual nos permitirá relacionar constantes del movimiento a simetrías del hamiltoniano.

Consideremos una familia continua de transformaciones canónicas, es decir, una familia de coordenadas parametrizada de manera continua y diferenciable por un parámetro θ .

$$\xi^\alpha = \xi^\alpha(\xi_0, t, \theta) \quad (3.60)$$

Donde ξ_0^α representa las coordenadas iniciales. Tomaremos sin pérdida de generalidad que $\theta = 0$ corresponde a la transformación identidad.¹² Vamos a probar a continuación que la condición suficiente para que una familia de transformaciones sea canónica es que exista una función $G(\xi, t, \theta)$ que satisfaga:

$$\frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} = \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \xi^\beta} \quad (3.61)$$

Para ello comenzamos por considerar la relación en derivadas parciales de F (3.46):

$$\frac{\partial F}{\partial \xi_0^\mu} = \lambda_{\mu\nu} \xi_0^\nu - \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \xi_0^\mu} \xi^\beta$$

Derivamos esta expresión con respecto a θ .

$$\begin{aligned} 0 &= \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \theta} + \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \xi^\alpha}{\partial \xi_0^\mu \partial \theta} \xi^\beta + \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_0^\mu \partial \theta} = \\ &= \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \theta} - \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \xi_0^\mu} \left(\lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} \xi^\beta \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_0^\mu \partial \theta} = \\ &= -\gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \xi_0^\mu} \left(\lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} \xi^\beta + \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) = \\ &= -\gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} + \frac{\partial \bar{G}}{\partial \xi_0^\mu} \end{aligned} \quad (3.62)$$

Donde se ha definido la función \bar{G} como:

$$\bar{G}(\xi_0, t, \theta) = \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} \xi^\beta + \frac{\partial F}{\partial \theta} \quad (3.63)$$

Si a (3.62) lo multiplicamos por $\partial \xi_0^\mu / \partial \xi^\nu$:

$$0 = -\gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} \frac{\partial \xi_0^\mu}{\partial \xi^\nu} + \frac{\partial \bar{G}}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi_0^\mu}{\partial \xi^\nu} = -\gamma_{\alpha\beta} \delta_\nu^\alpha \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \theta} + \frac{\partial \bar{G}}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi_0^\mu}{\partial \xi^\nu} \quad (3.64)$$

Y ahora por $\gamma^{\alpha\nu}$:

$$0 = -\delta_\beta^\alpha \frac{\partial \xi^\beta}{\partial \theta} + \gamma^{\alpha\nu} \frac{\partial \bar{G}}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi_0^\mu}{\partial \xi^\nu} = -\frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} + \gamma^{\alpha\nu} \frac{\partial \bar{G}}{\partial \xi_0^\mu} \frac{\partial \xi_0^\mu}{\partial \xi^\nu} \quad (3.65)$$

Definiendo la función G para que sea \bar{G} expresada en términos de las coordenadas transformadas

$$G(\xi, t, \theta) = \bar{G}(\xi_0(\xi, t, \theta), t, \theta) \quad (3.66)$$

Llegamos finalmente a la ecuación (3.61):

$$\frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} = \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \xi^\beta}$$

¹²Nótese el cambio de notación. Ahora una transformación canónica concreta viene dada por $\eta^\alpha = \xi^\alpha(\xi_0, t, \theta)$ para un θ fijo.

De ella se sigue que cualquier función arbitraria G sobre el espacio de fases es generadora de una familia de transformaciones canónicas parametrizadas por θ . A menudo se denomina a G **función generatriz infinitesimal**. Dicho nombre proviene de que para pequeñas variaciones en el parámetro θ se prueba que la transformación irá como:

$$\xi^\alpha = \xi_0^\alpha + \gamma^{\alpha\beta} \left. \frac{\partial G}{\partial \xi^\beta} \right|_{\theta=0} \delta\theta \quad (3.67)$$

Tomémonos unos minutos para analizar más en profundidad la ecuación (3.61). Considerando unas coordenadas iniciales ξ_0 , la función generatriz infinitesimal nos permite obtener las sucesivas transformaciones canónicas $\xi(\theta)$, conocidas como **órbitas**, las cuales no son más que conjuntos de sistemas de coordenadas que definen el espacio de fases.

Es preciso apreciar, por otra parte, que (3.61) es formalmente idéntica a las ecuaciones de Hamilton (2.32) si sustituimos $\theta \rightarrow t$ y $G \rightarrow H$. Esto nos da una nueva interpretación de la física, ya que el movimiento de un determinado sistema en el espacio de fases puede interpretarse como las órbitas, parametrizadas por t , de la familia de transformaciones canónicas, cuyo generador va a ser el hamiltoniano. Este intrigante descubrimiento constituye la base de la teoría de Hamilton-Jacobi, analizada en el próximo capítulo.

Estudiemos en este marco el comportamiento de una variable dinámica ante transformaciones canónicas continuas. Sea $R(\xi, t)$ una variable dinámica, su variación con θ será:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\partial R}{\partial \xi^\alpha} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} = \frac{\partial R}{\partial \xi^\alpha} \gamma^{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \xi^\beta} = [R, G] \quad (3.68)$$

De este modo, R es invariante bajo la familia de transformaciones si:

$$\frac{dR}{d\theta} = [R, G] = 0 \quad (3.69)$$

Por otra parte, si tomamos como variable dinámica el propio hamiltoniano $R = H$, entonces

$$\frac{dH}{d\theta} = [H, G] \quad (3.70)$$

Esta última ecuación se hará 0 si el hamiltoniano es invariante ante la transformación. Pero si G no depende explícitamente del tiempo entonces será una cantidad conservada. Se prueba, por tanto, que cantidades que no dependen explícitamente del tiempo son generadores infinitesimales de las transformaciones bajo las cuales el Hamiltoniano se hace invariante.

En el contexto algebraico, se ha dotado al grupo que representa la transformación canónica continua de una variedad diferenciable. Hablamos entonces de grupos de Lie, especialmente empleados en la invariancia bajo rotaciones, entre otros ejemplos. En efecto, los grupos de Lie que forman las transformaciones canónicas continuas y cuyos generadores infinitesimales son constantes del movimiento se denominan **grupos de simetría**. Dichas transformaciones dejan invariante al hamiltoniano y su obtención se aproxima más a la resolución de problemas mecanocuánticos.

4. Ecuación de Hamilton-Jacobi

En la sección anterior, vimos que una transformación canónica continua tiene asociada una función generatriz infinitesimal, según la ecuación (3.62). También se comprobó que si tomamos $G = H$, obtenemos de vuelta las ecuaciones de Hamilton para $\theta = t$. De este modo, las ecuaciones canónicas del movimiento quedan representadas por una transformación canónica continua, parametrizada por el tiempo, y cuyo generador infinitesimal es el hamiltoniano. En esta sección, vamos a tratar de encontrar la función generatriz de dicha transformación, lo cual nos permitirá trazar el marco de la teoría de Hamilton-Jacobi y obtener la ecuación homónima.

Vamos a considerar un conjunto de coordenadas inicial en el espacio de fases $\xi_0^\alpha \equiv (q_0, p_0)$. Una transformación canónica como la recién comentada, aportará las ecuaciones del movimiento $\xi^\alpha(\theta) = \xi^\alpha(t)$.

Se ha estudiado ya que, según (3.63) y (3.66), la función generatriz infinitesimal se escribe como:

$$G(\xi, t, \theta) = \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial \xi^\alpha}{\partial \theta} \xi^\beta + \frac{\partial F}{\partial \theta} \quad (4.1)$$

Siendo $F(\xi_0, t_0, \theta)$ la función generatriz. Si ahora tomamos $G = H$ y $\theta = t$, la ecuación anterior nos queda de la forma:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = H(\xi, t) - \lambda_{\alpha\beta} \dot{\xi}^\alpha \xi^\beta \quad (4.2)$$

Integrando la expresión anterior entre t_0 y t , obtenemos $F(\xi, t_0, t)$. Pero el término de la derecha de (4.2) no es más que el lagrangiano $L(q', \dot{q}', t')$. En consecuencia, se comprueba que la función generatriz de esta transformación canónica equivale al funcional de acción.

$$F(\xi, t_0, t) \equiv S(q, t, q_0, t_0) = \int_{t_0}^t L(q', \dot{q}', t') dt' \quad (4.3)$$

A esta función S se la suele conocer como función principal. El objetivo a continuación es obtener la diferencial exacta dS . Para el lagrangiano es obvio que a un tiempo fijo:

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \delta q^\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \delta \dot{q}^\alpha = \dot{p}_\alpha \delta q^\alpha + p_\alpha \delta \dot{q}^\alpha \quad (4.4)$$

Entre los puntos inicial y final, como la variación que consideramos es a tiempo constante:

$$\delta S = \delta \int_{t_0}^t L dt = \int_{t_0}^t \delta L dt = p_\alpha \delta q^\alpha - p_{\alpha 0} \delta q_0^\alpha \quad (4.5)$$

Para la variación temporal, es fácil ver que:

$$L(t) = \frac{\partial S}{\partial q^\alpha} \frac{\partial q^\alpha}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (4.6)$$

Donde si despejamos $\partial S / \partial t$ obtenemos que:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L(t) - p_\alpha \dot{q}^\alpha = -H(t) \quad (4.7)$$

Luego, como (4.7) funciona arbitrariamente para cualquier t , uniéndola (4.5), llegamos a que:

$$dS = p_\alpha dq^\alpha - p_{\alpha 0} dq_0^\alpha - H dt + H_0 dt_0 \quad (4.8)$$

Tenemos todos los elementos necesarios para obtener la ecuación de Hamilton-Jacobi. Tomemos ahora $2n$ parámetros u^α y v_α , de modo que sean función de los anteriores de manera que:

$$v_\alpha du^\alpha = p_{\alpha 0} dq_0^\alpha \quad (4.9)$$

Trivialmente se verifica que la función principal $S'(u, q, t_0, t)$ actúa del mismo modo que lo hace $S(q_0, q, t_0, t)$, dado que:

$$dS' = dS = p_\alpha dq^\alpha - v_\alpha du^\alpha - H dt + H_0 dt_0 = p_\alpha dq^\alpha - p_{\alpha 0} dq_0^\alpha - H dt + H_0 dt_0 \quad (4.10)$$

Ahora, sin pérdida de generalidad podemos considerar $t_0 = 0$. Suponiendo que las trayectorias vienen descritas por los parámetros (u^α, v_α) en vez de por los ξ_0^α , la función principal queda descrita por $S = S(q, u, t)$. De este modo, ahora

$$dS = p_\alpha dq^\alpha - v_\alpha du^\alpha - H dt \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial S}{\partial u^\alpha} = -v_\alpha \quad \frac{\partial S}{\partial q^\alpha} = p_\alpha \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H \quad (4.12)$$

Podemos unir las dos últimas expresiones en (4.12) y el resultado es el siguiente:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H \left(q^\alpha, \frac{\partial S}{\partial q^\alpha}, t \right) = 0 \quad (4.13)$$

Obtenemos así la ecuación de Hamilton-Jacobi, una ecuación diferencial en derivadas parciales para S . El conocimiento de dicha función supone la resolución directa a través de (4.12). El proceso que se ha de seguir queda recalcado en los siguientes puntos.

1. Obtener el hamiltoniano del sistema y expresar los momentos como $p_\alpha = \partial S / \partial q^\alpha$.
2. Resolver la ecuación de Hamilton-Jacobi en derivadas parciales. Las constantes de integración serán u_α y en cada caso dependerán del problema estudiado.
3. Con las ecuaciones (4.12) se determinan las constantes v_α . Como $S = S(q, u, t)$, obtenemos ecuaciones de la forma $f_\alpha(q, u, v, t) = 0$. Además también conocemos las curvas solución $p_\alpha(q, u, t)$. El problema está resuelto.

También recalcamos el hecho de que, tal y como está planteado, los parámetros (u^α, v_α) no tienen porqué corresponderse con posiciones y momentos, pueden ser cualquier cantidad física mientras verifiquen (4.9).

Sabemos además que S corresponde a la función generatriz de una transformación canónica de tipo I. Mediante la transformada de Legendre, podemos definir una nueva transformación canónica de tipo II, de modo que:

$$\bar{S}(q, v, t) = S(q, u, t) + u^\alpha v_\alpha \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial v_\alpha} = u^\alpha \quad \frac{\partial \bar{S}}{\partial q^\alpha} = p_\alpha \quad (4.15)$$

Sin embargo, la resolución de las ecuaciones en este caso es idéntica ya que \bar{S} no es más que S salvo una constante y verifican la misma ecuación de Hamilton-Jacobi.

Con el fin de comprender el sentido que subyace a la ecuación de Hamilton-Jacobi, vamos a analizar lo siguiente. Las transformaciones canónicas de tipo I vienen dadas por las ecuaciones (3.54) y (3.55), pero como se ha probado antes a través de las ecuaciones (4.2) y (4.3), la

función generatriz de esta transformación es la función principal. Concluimos que el nuevo hamiltoniano K es nulo.

$$K = H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (4.16)$$

Pero, ¿en qué sistema de coordenadas está descrito este hamiltoniano K ? ¡En (u, v) ! Hemos logrado obtener una transformación de coordenadas en el espacio de fases para la cual, las ecuaciones del movimiento son nulas. Éste será el marco teórico en el que nos moveremos de ahora en adelante.

4.1. Función característica de Hamilton

Vamos a restringir ahora nuestra teoría a casos en los que el hamiltoniano no dependa explícitamente del tiempo. Como ya conocemos, en estas situaciones $H = E$. Es decir, el hamiltoniano representa la energía del sistema y ésta es constante del movimiento. Trivialmente, esto implica que la segunda derivada de la acción con respecto al tiempo es nula:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = 0 \quad (4.17)$$

Es esta situación, la resolución de la ecuación de Hamilton-Jacobi (4.13) puede realizarse a través de una separación de variables:

$$S(q, v, t) = -Et + W(q, v), \quad H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = E \quad (4.18)$$

Ahora W es una función que depende de las n constantes v_α . A esta función se la conoce como función característica de Hamilton. A través de la separación de variables, vemos que la energía queda descrita por las v_α .

$$E = E(v_\alpha) \quad (4.19)$$

Las ecuaciones del movimiento del sistema vienen en este caso determinadas por:

$$p_\alpha = \frac{\partial W}{\partial q^\alpha} \quad u^\alpha = -\frac{\partial E}{\partial v_\alpha} + \frac{\partial W}{\partial v_\alpha} \quad (4.20)$$

Como la elección de las constantes v_α es en general arbitraria, la forma de la función (4.19) también lo es. Por ejemplo, la elección de

$$E = \sum_{\alpha=1}^n v_\alpha \quad (4.21)$$

daría la siguiente expresión para W , según (4.20):

$$\frac{\partial W}{\partial v_\alpha} = u^\alpha + t \quad (4.22)$$

Otra elección habitual es tomar la primera de las constantes como la energía $E = v_1$. Entonces las ecuaciones que describirían el movimiento del sistema serían:

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = E \quad \frac{\partial W}{\partial E} = u_1 + t \quad \frac{\partial W}{\partial v_\mu} = u^\mu, \quad \text{con } \mu = 2, \dots, n \quad (4.23)$$

En cualquiera de los casos, se aprecia la simplificación del problema para hamiltonianos independientes del tiempo. Paralelamente, cabe destacar que las variables q^α son separables

en la ecuación de Hamilton-Jacobi si una solución para W , expresada como suma de términos dependientes únicamente de un q^α , permite desacoplar la ecuación en n ecuaciones.

$$W = \sum_{\alpha} W_{\alpha}(q^{\alpha}, v_1, \dots, v_n) \Rightarrow H_{\alpha} \left(q^{\alpha}, \frac{\partial W_{\alpha}}{\partial q^{\alpha}}, v_1, \dots, v_n \right) = v_{\alpha} \quad (4.24)$$

4.2. Variables de acción-ángulo

El hecho de que un sistema sea totalmente separable, es decir, que la función característica pueda ser expresada como en (4.24), implica que cada p_{α} solo dependerá de su correspondiente q^{α} . En consecuencia, el movimiento queda simplificado al análisis de cada una de estas parejas. Si la trayectoria en cada plano α de la pareja de coordenadas (q^{α}, p_{α}) es periódica, surge definir un nuevo conjunto de coordenadas $(\phi_{\alpha}, J_{\alpha})$. Los nuevos momentos J_{α} identifican cada una de las trayectorias en el plano α y las coordenadas ϕ_{α} serán las nuevas variables angulares. A estas nuevas coordenadas se las conoce como variables angulares de acción. En concreto, J_{α} se define como¹³:

$$J_{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \oint p_{\alpha} dq^{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial W_{\alpha}}{\partial q^{\alpha}} dq^{\alpha} = J_{\alpha}(v) \quad (4.25)$$

Donde la integral se extiende a un periodo de la trayectoria en el plano α . Se comprueba que J_{α} es una constante, ya que depende únicamente de las v_{α} .

La ecuación de Hamilton Jacobi, nos permitía calcular $u(q, p)$ y $v(q, p)$. Sustituyendo estas ecuaciones en (4.25), obtendríamos $J_{\alpha}(q, p)$. Si ahora calculamos la función generatriz $W(q, v(J))$, con $v(J)$ la inversa de (4.25), obtenemos que las ecuaciones de la transformación son:

$$p_{\alpha} = \frac{\partial W}{\partial q^{\alpha}} \quad \phi_{\alpha} = \frac{\partial W}{\partial J_{\alpha}} \quad (4.26)$$

Ahora el nuevo hamiltoniano es únicamente función de los momentos:

$$K(\phi, J) = H \left(q, \frac{\partial W}{\partial q} \right) = E(J_1, \dots, J_n) = v_1(J_1, \dots, J_n) \quad (4.27)$$

$$\dot{J}_{\alpha} = -\frac{\partial E}{\partial J_{\alpha}} = 0 \quad \dot{\phi}_{\alpha} = \frac{\partial E}{\partial J_{\alpha}} = \omega_{\alpha}(J_1, \dots, J_n) \quad (4.28)$$

Como las J_{α} son constantes, la resolución para las coordenadas es:

$$\phi_{\alpha} = \omega_{\alpha} t + \phi_{\alpha 0} \quad (4.29)$$

La interpretación es entonces clara. Hemos analizado de manera general que para un sistema en el que las cantidades J_{α} , es decir, los momentos angulares del sistema en el espacio de fases, son constantes, entonces las coordenadas angulares ϕ_{α} van a describir un movimiento con una velocidad angular ω_{α} , también constante.

¹³En esta ecuación no se aplica el criterio de sumación.

5. Ejemplos y Aplicaciones a la Teoría de Hamilton-Jacobi

Ya hemos analizado los conceptos fundamentales de la teoría de Hamilton-Jacobi. Si bien es cierto que podemos ahondar en análisis mucho más exhaustivos y complejos de esta teoría, a continuación, presentaremos unos ejemplos de aplicaciones prácticas sobre esta teoría.

5.1. Problema de fuerzas centrales

El objetivo de este ejemplo es realizar un análisis de un sistema con una partícula en el seno de un potencial central $V(r)$. Aplicaremos este análisis a una partícula en un potencial de Coulomb, y posteriormente, incluiremos a dicho potencial una pequeña perturbación, para comprobar su influencia.

Comencemos por calcular el hamiltoniano de este sistema. Es claro, que para una partícula en un potencial central, el lagrangiano es de la forma¹⁴

$$L = \frac{1}{2m} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 \right) - V(r) \quad (5.1)$$

Calculamos los momentos canónicos asociados según (2.23) y a través de la transformada de Legendre (2.25) llegamos a la forma del hamiltoniano.

$$p_r = m\dot{r} \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta} \quad p_\phi = mr^2\sin^2\theta\dot{\phi} \quad (5.2)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2\sin^2\theta} \right) + V(r) \quad (5.3)$$

Ahora, con la ecuación de Hamilton-Jacobi (4.13), obtenemos la ecuación diferencial en derivadas parciales.

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 \right] + V(r) = 0 \quad (5.4)$$

Para su resolución, notamos primero que el hamiltoniano es independiente del tiempo y, en consecuencia, podemos resolver el problema a través de la función característica W . Tomamos además, $v_1 = E$ la energía del sistema.

$$S(r, \theta, \phi, E, v_2, v_3, t) = -Et + W(r, \theta, \phi, E, v_2, v_3) \quad (5.5)$$

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial W}{\partial \phi} \right)^2 \right] + V(r) = E \quad (5.6)$$

Por otra parte, resulta obvio que la coordenada ϕ es una constante del movimiento y, consecuentemente, su momento asociado p_ϕ se conserva. Tomamos entonces $v_2 = p_\phi$ y realizamos la siguiente separación:

$$W = p_\phi \phi + \bar{W}(r, \theta, E, v_3) \quad (5.7)$$

$$\left(\frac{\partial \bar{W}}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial \bar{W}}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\phi^2 = 2m[E - V(r)] \quad (5.8)$$

¹⁴Trivialmente, al ser un potencial central consideramos un sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

La ecuación resultante es separable según (4.24).

$$\bar{W} = W_r(r) + W_\theta(\theta) \quad (5.9)$$

$$2mr^2[E - V(r)] - r^2 \left[\frac{\partial W_r}{\partial r} \right]^2 = \left[\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right]^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} = v_3^2 \quad (5.10)$$

Con la separación de variables completa ya tenemos la forma general de la función principal. Para un determinado potencial $V(r)$ la resolución de las derivadas parciales con las correspondientes condiciones iniciales nos dará el resultado general del movimiento del sistema.

$$S = p_\phi \phi + \int \left[v_3^2 - \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right]^{1/2} d\theta + \int \left[2m[E - V(r)] - \frac{v_3^2}{r^2} \right]^{1/2} dr - Et \quad (5.11)$$

Ahora vamos a considerar el potencial de Coulomb.

$$V(r) = -\frac{k}{r} \quad (5.12)$$

Notemos que en esta situación, cuando la energía del sistema es $E < 0$, las trayectorias serán periódicas. Esto nos permite emplear las variables de acción-ángulo, tal y como se explicó en el apartado anterior.

$$J_\phi = \frac{1}{2\pi} \oint p_\phi d\phi = p_\phi \quad (5.13)$$

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint p_\theta d\theta = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{dW}{d\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{v_3^2 - \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta \quad (5.14)$$

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint p_r dr = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{dW}{dr} dr = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2m \left[E + \frac{k}{r} \right] - \frac{v_3^2}{r^2}} dr \quad (5.15)$$

La resolución de estas integrales no es trivial. Para J_θ , el rango de integración va desde $\theta_0 = p_\phi/v_3$ hasta $\pi - \theta_0$. Considerando los cambios:

$$\cos \theta = \sqrt{1 - \frac{p_\phi^2}{v_3^2}} \sin \psi, \quad u = \tan \psi \quad (5.16)$$

La integral adquiere una forma sencilla y obtenemos:

$$J_\theta = v_3 - p_\phi \quad (5.17)$$

Para J_r , el radicando en la integral tiene que ser positivo y la energía negativa. Considerando pues un intervalo de integración entre r_1 y r_2 , la integral a resolver es la siguiente:

$$J_r = \frac{1}{\pi} \oint \sqrt{-2m|E| + \frac{2mk}{r} - \frac{v_3^2}{r^2}} dr \quad (5.18)$$

La cual puede resolverse a través de un cambio de variable $u = 1/r$.¹⁵ Llegamos así al valor real de J_r .

$$J_r = -v_3 + k \sqrt{\frac{m}{-2E}} \quad (5.19)$$

¹⁵Este cambio de variable es equivalente a considerar la ecuación de Binet en el desarrollo lagrangiano habitual.

Teniendo los valores de (J_r, J_θ, J_ϕ) , podemos expresar la energía en términos de dichas variables, según (4.27).

$$E = K = -\frac{k^2 m}{2(J_r + J_\theta + J_\phi)^2} \quad (5.20)$$

Y por (4.29), obtenemos la velocidad angular del sistema.

$$\omega_r = \omega_\theta = \omega_\phi = \frac{k^2 m}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^3} = \sqrt{\frac{-8E^3}{k^2 m}} \quad (5.21)$$

Físicamente, ω_θ y ω_ϕ representan las velocidades angulares de la partícula orbitando en torno al centro. Por otra parte, ω_r representa la oscilación entre r_1 y r_2 de la partícula en cuestión. Esto provoca un movimiento elíptico en torno al centro, que será, además, un foco de la elipse.

A continuación repetimos el proceso anterior para un potencial de Coulomb perturbado con un parámetro $\epsilon \ll 1$ como el representado en la figura 1.

$$V(r) = -\frac{k}{r} + \frac{\epsilon}{r^2} \quad (5.22)$$

Para los cálculos, ahora supondremos que el movimiento del sistema está restringido a $\theta = \pi/2$ y $p_\theta = 0$. Esto podemos hacerlo sin pérdida de generalidad ya que sigue verificando las ecuaciones del movimiento. Equivale a considerar que la partícula se mueve en un único plano en el espacio tridimensional habitual. Repitiendo los cálculos del proceso anterior, vemos que ahora el hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right] - \frac{k}{r} + \frac{\epsilon}{r^2} \quad (5.23)$$

La resolución de la ecuación característica indica que:

$$\frac{\partial W}{\partial r} = \sqrt{2m \left[E + \frac{k}{r} - \frac{\epsilon}{r^2} \right] - \frac{p_\phi^2}{r^2}} \quad (5.24)$$

Luego, el momento J_r sigue ahora la ecuación:

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2m \left[E + \frac{k}{r} - \frac{\epsilon}{r^2} \right] - \frac{p_\phi^2}{r^2}} dr \quad (5.25)$$

La cual, es idéntica a (5.15), sustituyendo $v_3 \rightarrow p_\phi^2 + 2m\epsilon$. Resolviendo por analogía obtenemos:

$$J_r = -\sqrt{p_\phi^2 + 2m\epsilon} + k\sqrt{\frac{m}{-2E}} \quad J_\phi = p_\phi \quad (5.26)$$

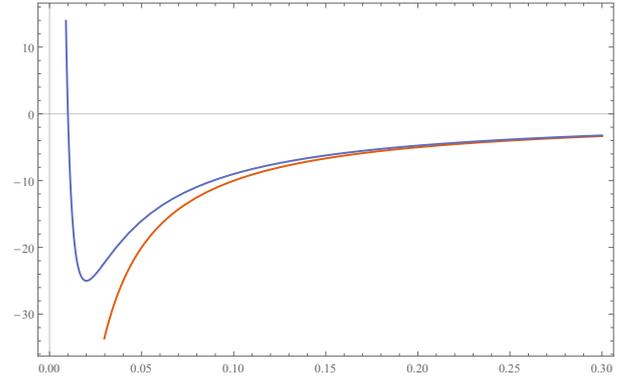


Figura 1: En rojo: potencial de Coulomb. En azul: potencial de Coulomb con una perturbación ϵ/r^2 .

Despejando la energía de estas ecuaciones se obtiene como resultado¹⁶

$$E = -\frac{mk^2}{2\left(J_r + \sqrt{J_\phi^2 + 2m\epsilon}\right)^2} \quad (5.27)$$

Ahora, al no ser simétrica la energía bajo un intercambio $J_r \leftrightarrow J_\theta$, las frecuencias ω_r y ω_ϕ serán distintas.

$$\omega_r = \frac{\partial E}{\partial J_r} = \frac{mk^2}{\left(J_r + \sqrt{J_\phi^2 + 2m\epsilon}\right)^3} = \sqrt{\frac{-8E^3}{mk^2}} \quad (5.28)$$

$$\omega_\phi = \frac{\partial E}{\partial J_\phi} = \frac{mk^2}{\left(J_r + \sqrt{J_\phi^2 + 2m\epsilon}\right)^3} \frac{J_\phi}{\sqrt{J_\phi^2 + 2m\epsilon}} = \sqrt{\frac{-8E^3}{mk^2}} \frac{J_\phi}{\sqrt{J_\phi^2 + 2m\epsilon}} \quad (5.29)$$

Al tratarse de frecuencias diferentes, obtenemos que la curva final no va a ser, en general, cerrada. Ésto ocurrirá únicamente en caso de que ω_ϕ sea un número entero de veces ω_r . Las variables ϕ_r y ϕ_ϕ se calculan como:

$$\phi_r(t) = \omega_r t + \alpha_r \quad (5.30)$$

$$\phi_\phi(t) = \omega_\phi t + \alpha_\phi \quad (5.31)$$

Físicamente, puede entenderse que, sin perturbación, la partícula describirá órbitas elípticas cerradas con velocidad angular ω_r . Si ahora aplicamos una perturbación, los ejes de coordenadas girarán junto con el sistema a una velocidad ω_ϕ , como se muestra en la figura 2. Al cabo de una vuelta, la diferencia de fase entre la posición de los ejes inicial y final se puede calcular como:

$$\Delta\phi = 2\pi \left(1 - \frac{\omega_\phi}{\omega_r}\right) \quad (5.32)$$

Es fácil imaginar aplicaciones prácticas de este problema. La teoría de un potencial de Coulomb perturbado puede ser empleada tanto en problemas de dinámica celeste, en problemas de 3 o más cuerpos, como en el estudio de la trayectoria de satélites al rededor de la tierra.

5.2. Átomo de Hidrógeno de Bohr-Sommerfeld

Relacionado con el ejemplo anterior, puede realizarse un análisis del movimiento de electrones al rededor del átomo de hidrógeno. Dicho análisis requiere una extensión de las leyes de la mecánica, dado que como bien sabemos, el movimiento de tales electrones está cuantizado, según los postulados de la mecánica cuántica. En este contexto, vamos a realizar el análisis de la cuantización de Sommerfeld desde el punto de vista de la teoría de Hamilton-Jacobi, la cual nos da una primera visión de la dinámica cuántica que rige estos sistemas.

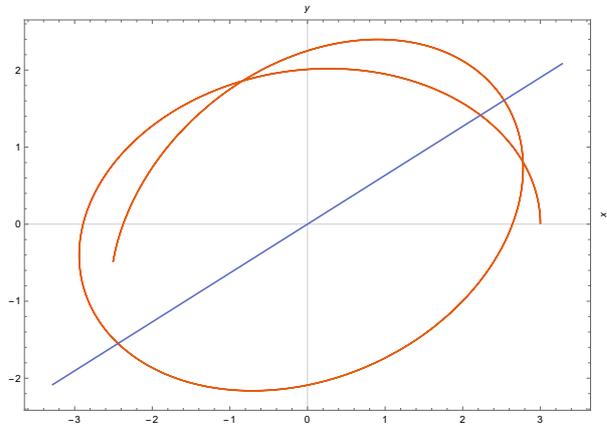


Figura 2: En rojo: representación del movimiento de una partícula bajo el potencial perturbado. En azul: giro sufrido por el eje de la elipse al cabo de un periodo.

¹⁶Nótese que si $\epsilon = 0$, trivialmente volvemos a (5.20), habiendo considerado además $J_\theta = 0$.

Conocemos que el potencial atractivo al que están sometidos los electrones es el potencial de Coulomb ¹⁷.

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (5.33)$$

Notamos que este potencial es trivialmente idéntico a (5.12) sustituyendo $k \rightarrow e^2$. De este modo, todas las ecuaciones obtenidas en el ejemplo anterior son válidas para este modelo.

Ahora, para explicar la cuantización de dicho movimiento, Sommerfeld propuso que las cantidades a cuantificar fuesen los momentos angulares de acción J_α ¹⁸.

$$J_\alpha = \frac{1}{2\pi} \oint p_\alpha dq^\alpha = n_\alpha \hbar \quad n_\alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (5.34)$$

Donde, a posteriori, sabemos que \hbar se corresponde con la constante de Planck reducida. Asumiendo que son estas cantidades J_α las que se cuantifican, podremos estudiar cuál va a ser la energía del átomo de hidrógeno. Aplicando (5.13) y (5.15), llegamos a:

$$J_\phi = \frac{1}{2\pi} \oint p_\phi d\phi = p_\phi = l\hbar \quad \text{con} \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.35)$$

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2m \left[E + \frac{k}{r} \right] - \frac{v_3^2}{r^2}} dr = k\hbar \quad \text{con} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.36)$$

La integral de J_r está resuelta en (5.19). Deducimos así que:

$$J_r = -v_3 + e^2 \sqrt{\frac{m}{-2E}} = k\hbar \quad J_\phi = p_\phi = l\hbar \quad (5.37)$$

Donde sabemos que $v_3 = p_\phi$ según (5.17). Juntando ambas expresiones y despejando la energía, definiendo $n = k + l$ con $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$E = -\frac{me^4}{2(\hbar n)^2} \quad (5.38)$$

Que es precisamente la energía del átomo de hidrógeno. Se comprueba trivialmente que para el estado fundamental dicha energía es de $-13,6eV$. El hecho de que la energía del átomo de hidrógeno quede especificada de esta manera, da una primera imagen del carácter cuántico de estos sistemas. Con todo, este modelo no permite explicar otros tantos efectos como el carácter ondulatorio de los electrones. Es por ello que se requiere una imagen más general sobre la relación entre la mecánica clásica y la cuántica, la cual abordaremos en el próximo ejemplo.

5.3. Obtención de la ecuación de Schrödinger

No podemos dejar de percibir la estrecha relación que existe entre la teoría cuántica y la teoría hamiltoniana. El ejemplo anterior da cuenta de que, efectivamente, la mecánica clásica resulta incompleta en determinadas circunstancias. Al mismo tiempo, si bien se ha mencionado en apartados anteriores la estrecha relación entre los conmutadores cuánticos y los corchetes de Poisson, ésto no ha quedado más que en un mero comentario.

¹⁷En unidades naturales del sistema.

¹⁸En esta fórmula no se emplea el criterio de sumación.

Una gran utilidad de la ecuación de Hamilton-Jacobi es que permite, en efecto, llegar a la ecuación de Schrödinger, dotando a las ecuaciones de un carácter ondulatorio. Merece la pena, por tanto, detenernos a analizar la relación entre ambas ecuaciones como una aplicación práctica para ampliar nuestra visión no solo de esta teoría, sino de la física en general.

Centrémonos únicamente en hamiltonianos independientes del tiempo. La función principal está descrita por (4.18)

$$S(q, v, t) = -Et + W(q, v)$$

En un sentido estrictamente matemático, tanto S como W representan hipersuperficies en el espacio de configuración. Lo que nos dice entonces la ecuación (4.18) es que S es el desplazamiento constante de una superficie $W(q, v)$. Así, para $t = 0$, $S = W$, pero al cabo de un tiempo dt la superficie S se va a haber desplazado una cantidad $-Edt$. Entonces la función principal representa frentes de onda que se propagan por es espacio de configuración.

Para una partícula, es fácil comprobar que el gradiente de la ecuación característica viene representado a través de¹⁹:

$$(\nabla W)^2 = 2m(E - V) \quad (5.39)$$

Vamos a comprobar que esta ecuación tiene un análogo asociado a la ecuación de ondas de la óptica geométrica, la ecuación Eikona. A continuación vamos a analizar dicha ecuación y comprobar cómo podemos dotar a la ecuación de Hamilton-Jacobi de un carácter ondulatorio. Fijémonos en la ecuación de ondas general:

$$\nabla^2 \phi - \frac{n^2}{c^2} \frac{d^2 \phi}{dt^2} = 0 \quad (5.40)$$

Donde $n = c/v$ representa el índice de refracción. La solución general de esta ecuación puede expresarse de la forma siguiente:

$$\phi = e^{A(\mathbf{r}) + ik_0(L(\mathbf{r}) - ct)} \quad (5.41)$$

Siendo A y L son funciones de la posición reales. Si aplicamos a esta ecuación sucesivamente el operador gradiente, obtenemos que:

$$\nabla \phi = \phi \nabla(A + ik_0 L) \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= \phi [\nabla^2(A + ik_0 L) + (\nabla(A + ik_0 L))^2] \\ &= \phi [\nabla^2 A + ik_0 \nabla^2 L + (\nabla A)^2 - k_0^2 (\nabla L)^2 + 2ik_0 \nabla A \nabla L] \end{aligned} \quad (5.43)$$

E introduciendo esto en (5.40) llegamos a:

$$ik_0 [2\nabla A \nabla L + \nabla^2 L] \phi + [\nabla^2 A + (\nabla A)^2 - k_0^2 (\nabla L)^2 + n^2 k_0^2] \phi = 0 \quad (5.44)$$

Como L y A son funciones reales, las partes real e imaginaria de la expresión anterior se habrán de anular de manera independiente. Consideremos ahora que nos hayamos en la situación en que la longitud de onda es pequeña en comparación con las dimensiones del problema. Esta es la hipótesis empleada en la óptica geométrica al considerar objetos (espejos, lentes...) de tamaños muy superiores al de la longitud de onda, despreciando así efectos de difracción y de comportamiento ondulatorio. En estas circunstancias, los términos que contienen $k_0^2 = 4\pi^2/\lambda_0^2$ serán los predominantes. Así, de (5.44) deducimos que:

$$(\nabla L)^2 = n^2 \quad (5.45)$$

¹⁹Basta con considerar un hamiltoniano en coordenadas cartesianas $H = p^2/2m + V$.

Ésta es la conocida como la ecuación Eikonal. Explica que, efectivamente, los frentes de onda se propagan por el espacio, de modo que las trayectorias de los haces de luz son perpendiculares a dichos frentes. Notemos que la ecuación (5.39) es formalmente idéntica a la ecuación Eikonal, sustituyendo $n \rightarrow 2m(E - V)$ y $L \rightarrow W$. El hecho de que ambas ecuaciones sean idénticas nos permite trazar un marco en el que podamos considerar las ecuaciones de la mecánica ondulatorias, deshaciendo las simplificaciones de la ecuación Eikonal en la de Hamilton-Jacobi (5.39).

De este modo, la asociación de L con W implicaría que S debe asociarse a la fase total.

$$k_0(L(\mathbf{r}) - ct) \rightarrow S$$

$$2\pi \left(\frac{L}{\lambda_0} - \nu t \right) \rightarrow W - Et$$

De donde obtendríamos directamente que la energía E de la partícula y la frecuencia ν son proporcionales, $E = h\nu$. Definiendo $\hbar = h/2\pi$, llegamos a que la función de onda para una partícula sería:

$$\psi = \psi_0 e^{iS/\hbar} \quad (5.46)$$

Vamos a introducir esta expresión en la ecuación de Schrödinger.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (5.47)$$

Aplicando el operador gradiente y derivando con respecto al tiempo, llegaremos a las expresiones:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \psi \frac{\partial S}{\partial t} \quad \nabla \psi = \frac{i}{\hbar} \psi \nabla S \quad \nabla^2 \psi = \frac{i}{\hbar} \psi \nabla^2 S - \frac{\psi}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \quad (5.48)$$

$$\left[\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V \right] + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S \quad (5.49)$$

Se comprueba que el término entre corchetes de la expresión anterior representa el hamiltoniano del sistema. No solo eso. Ésta expresión se correspondería con la ecuación de Hamilton-Jacobi para una partícula en caso de que el término de la derecha fuese nulo. Se verifica así que el límite clásico se produce para $\hbar \rightarrow 0$, o equivalentemente, cuando la longitud de onda de la partícula es muy pequeña en comparación con las dimensiones del sistema estudiado. A menudo a la ecuación (5.49) se la conoce como la ecuación mecanocuántica de Hamilton-Jacobi.

Esta teoría unifica de una vez por todas las visiones de la mecánica cuántica y la clásica. El hecho de que podamos unificar dicha visión supone un gran avance en la comprensión de ambas teorías. Se especula que cuando Hamilton observó en 1834 la relación entre la ecuación Eikonal y la de Hamilton-Jacobi pudo haber llegado a la ecuación de Schrödinger. No obstante, todavía en el siglo XIX, no existían pruebas experimentales del comportamiento ondulatorio de la materia. Es por ello que Hamilton no tenía razones para suponer que dicha ecuación fuese válida.

6. Conclusiones

Desde un principio, la física ha tratado de comprender la evolución en el tiempo de los sistemas y sus variables dinámicas. El análisis que hemos realizado sobre las transformaciones en el espacio de fases, nos permite expresar los hamiltonianos de maneras alternativas, convirtiéndose así en una herramienta de gran potencial. Expresar un sistema en coordenadas generales, combinación de las coordenadas de posición y momento habituales, no solo nos simplifica el problema que estamos considerando, sino que además nos aporta información sobre la dinámica interna del mismo. Es preciso destacar, en este contexto, la importancia de las cantidades que se conservan en el tiempo.

Al mismo tiempo, considerar transformaciones canónicas continuas, aporta una noción algebraica tan importante, tanto para la mecánica clásica como para la física contemporánea, como es la noción de los grupos de Lie. El análisis de dichas transformaciones nos aporta una nueva interpretación, a saber, que la evolución temporal del sistema puede interpretarse como una transformación canónica continua de coordenadas en el espacio de fases, siendo el hamiltoniano el generador infinitesimal de la transformación y el tiempo la cantidad que la parametriza.

Todo ello, nos induce de una manera directa a la deducción de la ecuación de Hamilton-Jacobi, la cual, a todos los efectos, nos genera la transformación de coordenadas necesaria para que el nuevo hamiltoniano sea nulo. Si bien esta ecuación no es trivial, se comprueba fácilmente que, bajo asunciones razonables como la de Hamiltonianos independientes del tiempo, entre otras, su resolución se simplifica.

La generalidad de dicha ecuación permite abordar multitud de problemas de muy diversa índole, siendo una de sus mayores aplicaciones el estudio de movimiento de partículas bajo potenciales centrales, lo cual permite realizar análisis complejos en dinámica celeste. Además, la ecuación de Hamilton-Jacobi supone un punto de partida hacia la mecánica cuántica cuando se le dota de un carácter ondulatorio, verificando el cumplimiento de la ecuación de Schrödinger.

Y es que si bien es cierto que en la física contemporánea la mecánica clásica es una rama de la física que estuviera quedando relegada a un segundo plano en muchas circunstancias, no cabe duda de que, entendiéndola en profundidad, nos aproximamos un poco más al discernimiento de la realidad en si misma.

Bibliografía

Los siguientes libros comprende aquellos textos que, de entre los muchos existentes sobre este tema y relacionados, han sido empleados para la escritura de este proyecto.

- [1] J. Ibáñez and J. Carot, *Mecánica Teórica*, 2010; Editorial Reverté.
- [2] E. J. Saletan & A. H. Cromer, *Theoretical Mechanics*, 1971; John Wiley & Sons, Inc.
- [3] H. Goldstein, *Mecánica Clásica*, 1988; Editorial Reverté.
- [4] W. Greiner, *Classical Mechanics, Systems of Particles & Hamiltonian Dynamics*, 1935; Springer
- [5] W. L. Burke, *Applied Differential Geometry*, 1985; Cambridge University Press