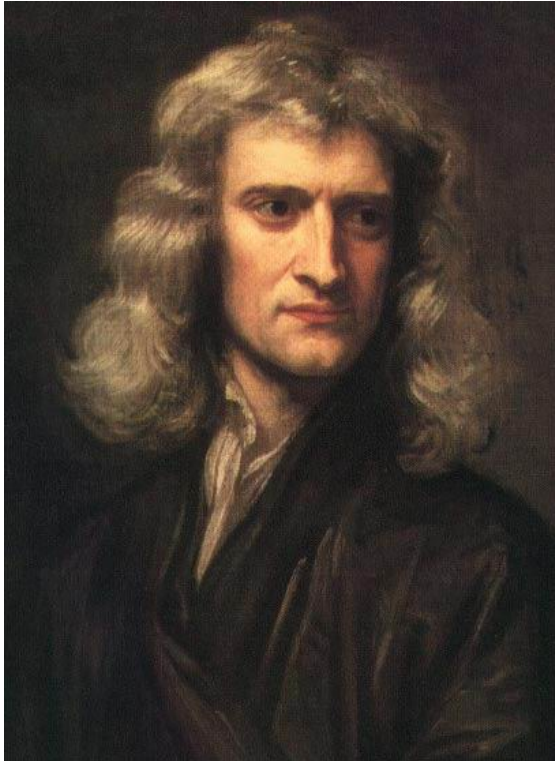


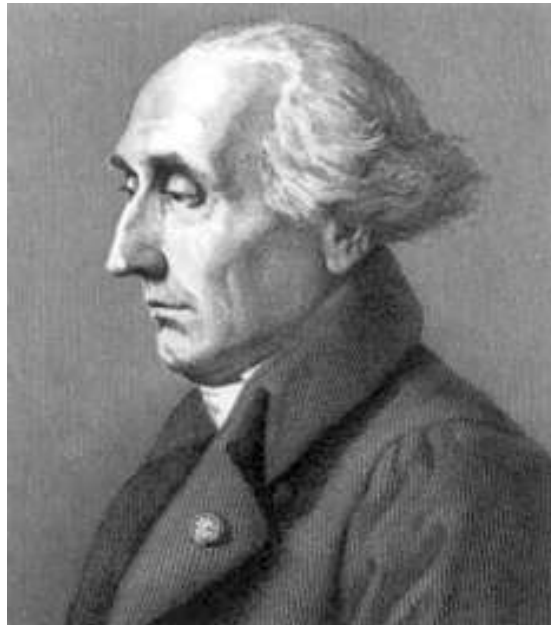
Capítulo 0.

Breve introducción a la mecánica clásica

Puede parecer extraño comenzar un curso de introducción a la Mecánica Cuántica con una lección sobre Mecánica Clásica, pero las razones para hacerlo son poderosas. En primer lugar está la nada despreciable realidad de que la formulación clásica sigue siendo válida, aunque ahora sabemos que su ámbito de validez tiene límites. El tratamiento de cuerpos y materiales a muchas escalas requiere la reunión de las técnicas cuánticas con las derivadas de la mecánica y el electromagnetismo clásico. Empero, la segunda motivación es aun más poderosa. Los físicos que desarrollaron el formalismo cuántico lo hicieron fuertemente influidos por las herramientas y conceptos que se habían demostrado más flexibles y poderosos en el tratamiento clásico. Una buena comprensión de la Física Clásica facilita entender la estructura y el significado de los conceptos cuánticos. Hemos de lamentar profundamente que en la educación de las nuevas generaciones de químicos españoles se haya renunciado a impartir estos conocimientos, como se ha renunciado a tantas otras herramientas básicas de las que nuestros alumnos se demuestran, día tras día, huérfanos.



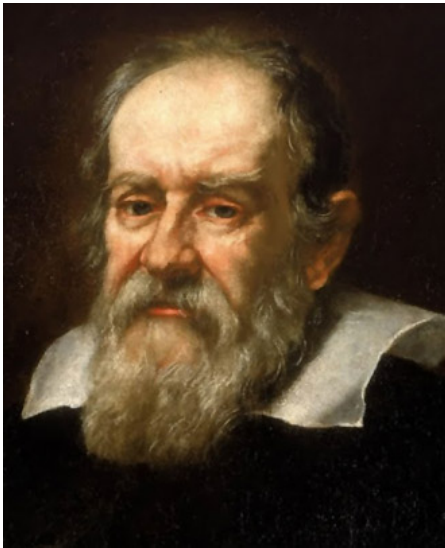
Isaac Newton (1643–1727)



Joseph Louis Lagrange
(1736–1813)



William Rowan Hamilton
(1805–1865)



Galileo Galilei
(1564–1642)



Leonhard Euler
(1707–1783)



Carl Gustav Jacob
Jacobi (1804–1851)



Amalie Emmy Noether
(1882–1935)

Ley de gravitación universal (1687) Dos partículas de masa m_1 y m_2 situadas en la posición $\vec{r}_1$ y $\vec{r}_2$, respectivamente, se atraen mutuamente con una fuerza que es proporcional al producto de sus masas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa:

$$\vec{f}_{12} = G \frac{m_1 m_2}{r_{12}^2} \vec{u}_{12}, \quad \vec{u}_{12} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}, \quad (1)$$

donde $\vec{u}_{12}$ es el vector unitario en la dirección que une ambas partículas.

- Constante de gravitación universal: $G = 6,674\,28 \cdot 10^{-11} \text{ Nm}^2\text{kg}^{-2}$.
- Si M es la masa de la Tierra ($5,973\,6 \cdot 10^{24} \text{ kg}$), R el radio promedio de la superficie terrestre ($6,371\,01 \cdot 10^6 \text{ m}$), entonces $g = GM/R = 9,806\,65 \text{ ms}^{-2}$, y un objeto de masa m situado en la superficie terrestre se ve atraído hacia el centro del planeta con una fuerza: $\vec{f} = m\vec{g}$.
- Debido a que la Tierra no es una esfera, g muestra una variación significativa con la latitud ϕ ($-\pi/2$ radianes en el Polo Sur y $+\pi/2$ en el Polo Norte). También disminuye al aumentar la altura, h (m) medida sobre el nivel medio de la superficie marina. Ambos efectos se recogen en ecuaciones como

$$g(\phi, h) = 9,780\,327 \left(1 + 5,302\,4 \cdot 10^{-3} \sin^2 \phi - 5,8 \cdot 10^{-6} \sin^2 2\phi \right) - 3,086 \cdot 10^{-6} h \quad (2)$$

donde g viene dada en m/s^2 . Con un grado mayor de detalle, la medición local de g sirve para determinar las variaciones regionales de masa en la corteza terrestre. Se han llegado a desarrollar satélites especializados en estas mediciones.

Las leyes de Newton (1687)

Primera ley (inercia): Si ninguna fuerza neta actúa sobre una partícula es posible seleccionar un conjunto de sistemas de referencia, llamados *inerciales*, tales que observada la partícula desde los mismos su movimiento se produce sin cambio de velocidad. Esta ley se suele enunciar en forma simplificada como *Un cuerpo se mueve con velocidad constante hasta que una fuerza externa actúa sobre el mismo*.

Segunda ley (ecuación de movimiento): Observado desde un sistema de referencia inercial, el ritmo del cambio que sufre el momento lineal de una partícula equivale a la fuerza neta que actúa sobre la misma: $\vec{f} = d\vec{p}/dt = \dot{\vec{p}}$. El momento lineal es el producto de la masa por la velocidad de la partícula: $\vec{p} = m\vec{v}$.

Tercera ley (acción y reacción): Siempre que una partícula A ejerce una fuerza sobre otra partícula B, B ejerce simultáneamente una fuerza sobre A que es igual en magnitud y dirección pero de sentido opuesto: $\vec{f}_{AB} = -\vec{f}_{BA}$.

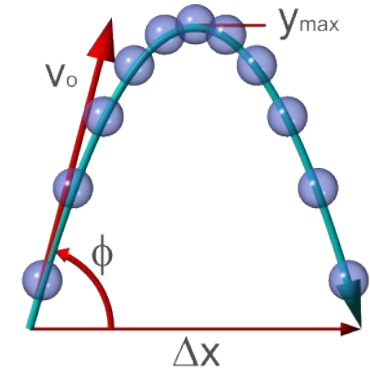
Ejemplo: Tiro parabólico

Posición inicial: $\vec{r}_0 = \vec{0}$.

Velocidad inicial: $\vec{v}_0 = \vec{u}_x v_0 \cos \alpha + \vec{u}_y v_0 \sin \alpha$.

Fuerza gravitatoria: $\vec{f} = -\vec{u}_y m g$.

Rozamiento: Nulo



La integración de las ecuaciones de movimiento es muy simple, dado que la fuerza que actúa sobre la partícula es constante.

Ecuaciones de movimiento: $\ddot{\vec{r}} = \vec{f}/m \Rightarrow \ddot{x} = 0; \quad \ddot{y} = -g$.

Primera integración: $\dot{\vec{r}} = \dot{\vec{r}}_0 + t\vec{f}/m \Rightarrow \dot{x} = v_0 \cos \alpha; \quad \dot{y} = v_0 \sin \alpha - gt$.

Segunda integración: $\vec{r} = \vec{r}_0 + t\dot{\vec{r}}_0 + \frac{1}{2}t^2\vec{f}/m \Rightarrow x = v_0 t \cos \alpha; \quad y = v_0 t \sin \alpha - \frac{1}{2}gt^2$.

Tiempo de vuelo: $y(t_v) = 0 \Rightarrow t_v = \frac{2v_0}{g} \sin \alpha$.

Alcance del proyectil: $\Delta x = x(t_v) = v_0 t_v \cos \alpha = \frac{2v_0^2}{g} \sin \alpha \cos \alpha$.

El alcance del proyectil es máximo para $\alpha = 45^\circ$: $\Delta x = v_0^2/g$.

El problema se complica sustancialmente en presencia de fuerzas de rozamiento, $\vec{f} = -k\vec{v}$ (condiciones de flujo laminar del aire), o si existe viento que afecte al movimiento del proyectil. Sin embargo, podemos incluir estas y otras fuerzas fácilmente si integramos numéricamente.

Ejemplo: Tiro balístico

Integraremos las ecuaciones de movimiento usando la rutina `lsode` de octave. Para ello debemos convertir las ecuaciones de Newton en un sistema de ecuaciones diferenciales lineales acopladas. Supongamos que las fuerzas que actúan son la gravedad y una fuerza de rozamiento lineal.

Ecuaciones de Newton: $\ddot{\vec{r}} = \vec{f}/m = -g\vec{u}_y - \frac{k}{m}\vec{v}$.

Sistema lineal acoplado: $\dot{\vec{r}} = \vec{v}; \quad \dot{\vec{v}} = -g\vec{u}_y - \frac{k}{m}\vec{v}$.

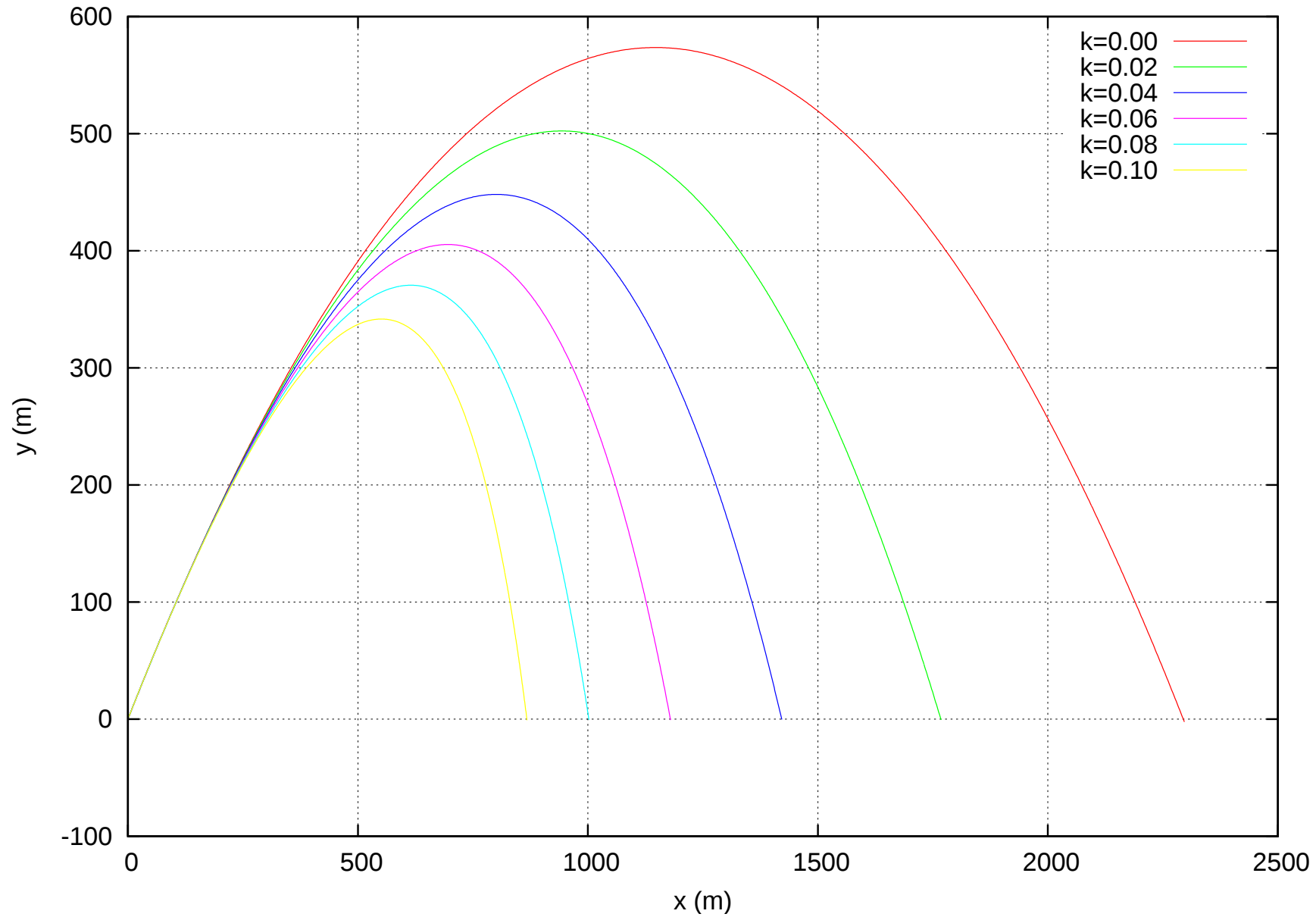
Variables del problema: $\vec{\xi} = (x, y, \dot{x}, \dot{y})$, con $\vec{\xi}_0 = (0, 0, v_0 \cos \alpha, v_0 \sin \alpha)$.

Ecuaciones de movimiento: $\dot{\vec{\xi}} = (\xi_3, \xi_4, -\frac{k}{m}\xi_3, -g - \frac{k}{m}\xi_4)$.

```
1 function xidot = mov(xi,t)
2 global k g m
3 xidot(1) = xi(3);
4 xidot(2) = xi(4);
5 xidot(3) = -(k/m)*xi(3);
6 xidot(4) = -g-(k/m)*xi(4);
7 endfunction
```

```
1 global k=0.1 g=9.80665 m=1
2 v0 = 150; alfa = pi/4;
3 xi0 = [0, 0, v0*cos(alfa), v0*sin(alfa)];
4 tvuelo = 2*v0*sin(alfa)/g;
5 t = linspace(0, tvuelo, 501);
6 xi = lsode('mov', xi0, t);
7 plot (xi(:,1), xi(:,2));
```

La fuerza de rozamiento produce una trayectoria claramente asimétrica, que no llega a la altura ni el alcance del tiro parabólico.



Momento angular y momento de las fuerzas:

Momento angular: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

Momento de las fuerzas: $\vec{N} = \vec{r} \times \vec{F}$. Llamado también torsión o torque.

Derivando $\vec{L}$ obtenemos: $\dot{\vec{L}} = \cancel{\vec{v} \times m\vec{v}} + \vec{r} \times \dot{\vec{p}} = \vec{r} \times \vec{F}$ y

$$\dot{\vec{L}} = \vec{N}. \quad (3)$$

Leyes de Conservación

Del momento lineal: En ausencia de fuerzas externas ($\vec{F} = \vec{0}$) el momento lineal total del sistema, $\vec{p}$, es constante.

Del momento angular: Si el momento total de las fuerzas es nulo ($\vec{N} = \vec{0}$) el momento angular total del sistema, $\vec{L}$, es constante.

De la energía: En sistemas conservativos las fuerzas provienen de un único potencial, que es además independiente de las velocidades de las partículas: $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. En tales sistemas las fuerzas son $\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_i V$ y la energía total, $H = T + V$, suma de las energías cinética (T) y potencial (V) permanece constante.

Limitaciones de la Mecánica Clásica

La Mecánica Clásica es un caso límite tanto de la Relatividad Especial como de la Física Cuántica:

- El momento lineal relativista de una partícula es $\vec{p} = m_0 \vec{v} / \sqrt{1 - (v/c)^2}$ y sólo cuando $v \ll c$ se obtiene la aproximación clásica $\vec{p} = m_0 \vec{v}$, donde m_0 es la masa en reposo de la partícula.
- Según la física cuántica, una partícula tiene una naturaleza dual, de onda y corpúsculo simultáneamente, y sólo cuando la longitud de onda de de Broglie, $\lambda = h/p$, es mucho menor que las dimensiones características del problema, las propiedades ondulatorias son despreciables y la respuesta clásica es correcta.

Dentro de sus limitaciones, la Mecánica Clásica sigue siendo tan vigente como en el momento de su formulación inicial en el siglo XVII.

Diferentes formulaciones de la Mecánica Clásica

- Establecer las fuerzas reales que actúan en un problema puede ser bastante complicado, particularmente cuando existen ligaduras que delimitan el rango posible de una o varias variables.
- Además, las ecuaciones de Newton cambian de forma y no se mantienen invariantes frente a transformaciones de coordenadas (rotaciones, traslaciones, etc).

Las formulaciones lagrangiana y hamiltoniana se crearon para resolver estas dificultades y proporcionar un aparato matemático más poderoso con el que enfrentar los problemas mecánicos.

Formulación Lagrangiana (1788)

Sea un sistema mecánico descrito en términos de coordenadas generalizadas independientes $(q_1, q_2, \dots, q_m)$ ^a y sea $L = T - V$ la Lagrangiana del sistema, donde T es la energía cinética y V es el potencial que actúa sobre el sistema. En ausencia de fuerzas de disipación las ecuaciones dinámicas de Lagrange tienen la forma siguiente:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad \text{para } i = 1 \dots m. \quad (4)$$

No importa que empleemos coordenadas cartesianas, esféricas polares, o cualquier otra transformación apropiada a la simetría del problema, las ecuaciones de Lagrange se mantienen invariantes. Además, la formulación en términos de coordenadas generalizadas permite evitar de antemano las coordenadas redundantes por causa de las ligaduras del problema.

^aEs decir, la posición de todas las partículas, una vez tenidas en cuenta las posibles ligaduras del sistema, se puede escribir en términos de las coordenadas generalizadas: $\vec{r}_k(q_1 \dots q_m)$ para todas las partículas $k = 1 \dots N$. En el espacio 3D el número de coordenadas generalizadas de un sistema de N partículas es $m = 3N - \text{ligaduras}$.

Relación entre la formulación Lagrangiana y las ecuaciones de Newton

La energía cinética de un sistema 3D de N partículas es

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} m_i \dot{q}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} p_i \dot{q}_i \quad (5)$$

donde q_i recorre las coordenadas cartesianas de todas las partículas, $\{x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\}$, y p_i las componentes cartesianas del momento lineal, $\{p_{x1}, p_{y1}, \dots, p_{zN}\}$.

Si el sistema es conservativo, es decir, si no hay disipación de la energía, L es independiente del tiempo y el potencial V depende sólo de las coordenadas de posición, pero no de las de velocidad de las partículas. En este caso las fuerzas derivan del potencial y

$$f_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \quad (6)$$

Además

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (7)$$

de modo que la segunda ley de Newton equivale a

$$f_i = \dot{p}_i \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \quad (8)$$

que no es sino la ecuación de Lagrange para la coordenada i -ésima.

Ejemplo: Péndulo Simple

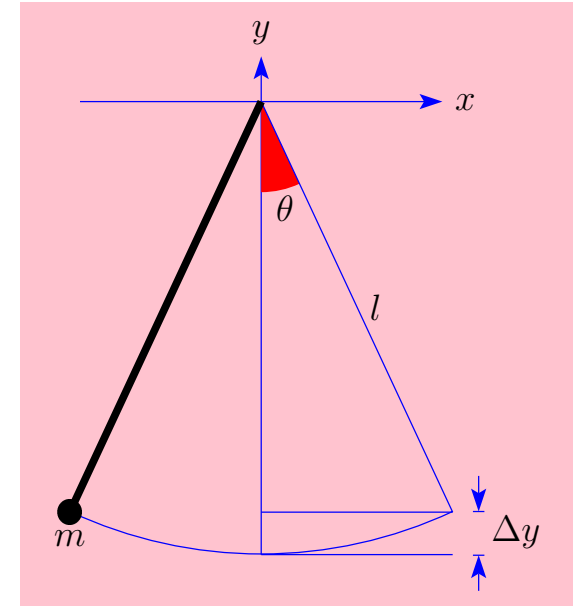
Posición del péndulo: $(x, y) = (l \sin \theta, -l \cos \theta)$.

Velocidad: $(\dot{x}, \dot{y}) = (l\dot{\theta} \cos \theta, +l\dot{\theta} \sin \theta)$.

Energía cinética: $T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \dots = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2$.

Energía potencial (gravitatoria): $V = mg\Delta y = mgl(1 - \cos \theta)$.

Lagrangiana: $L = T - V = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 - mgl(1 - \cos \theta)$.



Ecuaciones de Lagrange:

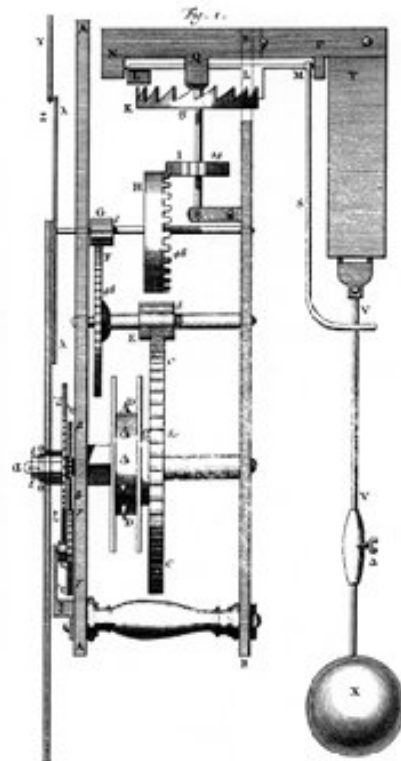
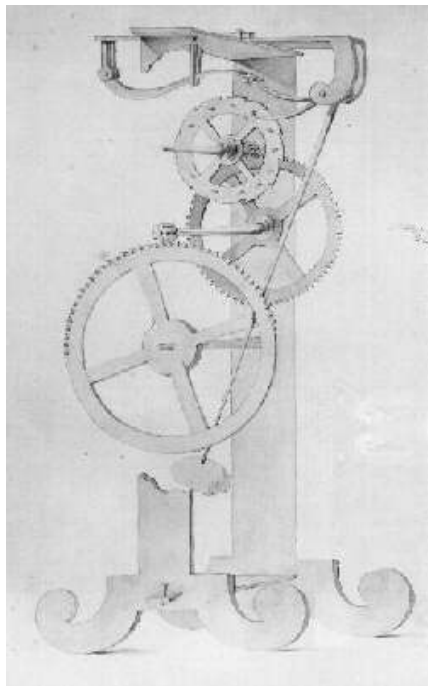
$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2\dot{\theta}, \quad \frac{\partial L}{\partial \theta} = -mgl \sin \theta \Rightarrow \ddot{\theta} = -\frac{g}{l} \sin \theta = -\omega_0^2 \sin \theta. \quad (9)$$

En el caso de **pequeñas oscilaciones** $\sin \theta \approx \theta$ y

$$\ddot{\theta} = -\omega_0^2 \theta \Rightarrow \theta(t) = A \sin(\omega_0 t + \varphi), \quad (10)$$

siendo $A = \theta_{\max}$ la amplitud de la oscilación, $\omega_0 = \sqrt{g/l}$ la frecuencia, y φ el ángulo de fase. El período es el menor tiempo $\tau > 0$ tal que $\theta(t+\tau) = \theta(t)$, de donde $\tau = 2\pi/\omega_0 = 2\pi\sqrt{l/g}$.

Galileo Galilei fue el primero en observar que el período del péndulo es independiente de la amplitud de la oscilación y de la masa y sólo depende de la longitud l . Esta propiedad, llamada *isocronismo*, ha sido aprovechada desde el siglo XVII para la construcción de relojes mecánicos precisos. El propio Galileo fue autor, hacia 1602, de un influyente diseño que incorporaba un mecanismo de compensación de la energía perdida por rozamiento y que sirvió de base para el reloj pendular desarrollado en 1656 por Christian Huygens.



Diseño de un reloj de péndulo debido a Galileo, que el autor no llegó a construir (izquierda) y segundo modelo patentado por Huygens (derecha), capaz de alcanzar una precisión de 10 segundos por día.

La isocronía del péndulo simple sólo es exacta en el límite de pequeñas oscilaciones. De modo más general:

$$\tau = 2\pi \sqrt{\frac{g}{l}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \right]^2 \frac{\theta_{\max}^{2n}}{2} = 2\pi \sqrt{\frac{g}{l}} \left(1 + \frac{1}{4} \theta_{\max}^2 + \dots \right). \quad (11)$$

Si calculamos la energía del péndulo: $H = T + V = \frac{1}{2} l^2 m \dot{\theta}^2 + mgl(1 - \cos \theta)$. Para pequeños ángulos podemos servirnos de un desarrollo en serie de Taylor:

$$\cos \theta = 1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{4!} - \frac{\theta^6}{6!} + \frac{\theta^8}{8!} + \dots \Rightarrow 1 - \cos \theta \approx \frac{\theta^2}{2}, \quad (12)$$

y

$$H = \frac{1}{2} m l^2 \omega_0^2 A^2 \cos^2(\omega_0 t + \varphi) + \frac{1}{2} mgl A^2 \sin^2(\omega_0 t + \varphi) = \dots = \frac{1}{2} mgl A^2 \quad (13)$$

Esta energía se mantiene constante durante toda la oscilación, aunque su reparto entre T y V varía. En los extremos de la oscilación el movimiento del péndulo se detiene y $H = V$, mientras que para una elongación nula $H = T$ y se produce una velocidad angular máxima $|\dot{\theta}| = \theta_{\max} \sqrt{g/l}$.

Ejemplo: Péndulo Simple (Solución numérica general) Prescindiremos de la aproximación de ángulo pequeño. También convertiremos la ecuación diferencial de segundo orden en dos ecuaciones acopladas de primer orden.

Ecuación de Lagrange: $\ddot{\theta} = -(g/l) \sin \theta$.

Ecuaciones de movimiento: $\vec{\xi} = (\theta, \dot{\theta}) \Rightarrow \dot{\vec{\xi}} = (\xi_2, -(g/l) \sin \xi_1)$ con $\vec{\xi}_0 = (-\theta_{\max}, 0)$.

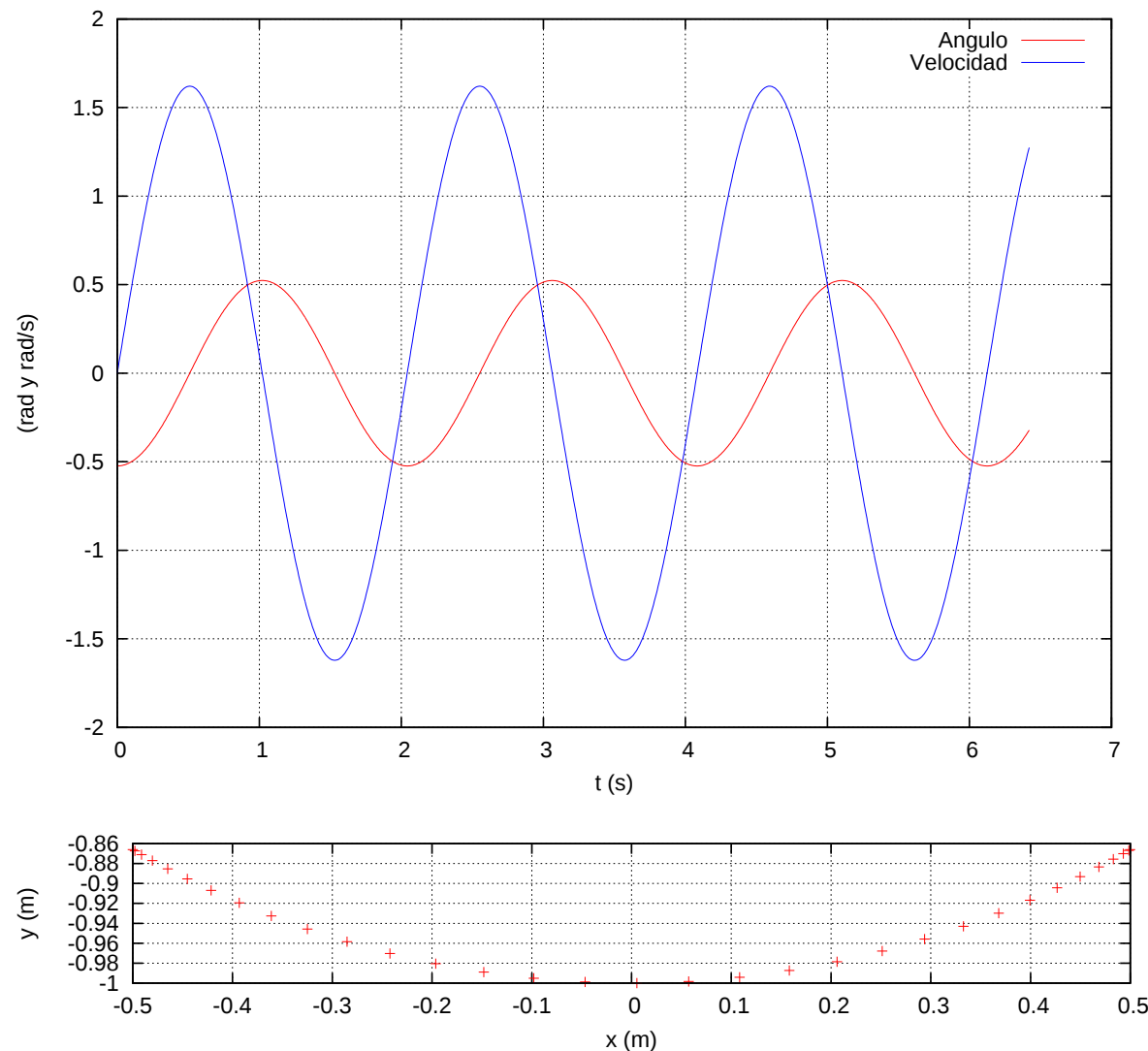
Posición del péndulo: $\vec{r} = (x, y) = (l \sin \theta, -l \cos \theta)$.

```

1  function xidot = pend(xi,t)
2  global l g m
3  xidot(1)=xi(2);
4  xidot(2)=-(g/l)*sin(xi(1));
5  endfunction
6  global m=1 l=1 g=9.80665
7  ThMax=10*pi/180;
8  xi0=[-ThMax,0];
9  Tau=2*pi*sqrt(l/g);
10 t=linspace(0,3*Tau,1001);
11 xi=lsode('pend',xi0,t);
12 grid('on'); plot(t,xi);
13 print('pend1.eps','-depsc');
    
```

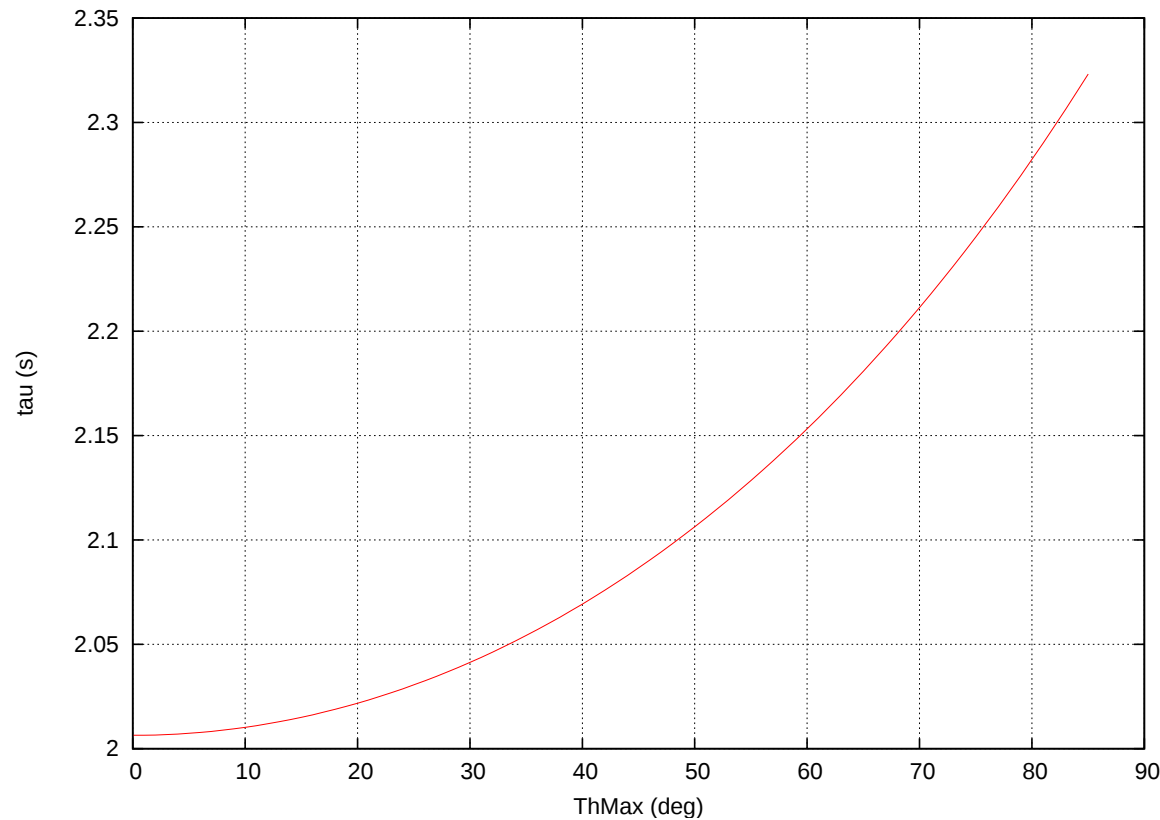
```

1  # Buscar el primer corte theta = 0
2  # para calcular el periodo real e
3  # interpolar para precisar el corte:
4  Th=xi(:,1)'; iz=min(find(Th >= 0));
5  vecinos=iz-1:iz+1;
6  c=polyfit(t(vecinos),Th(vecinos),1);
7  r=roots(c); TauReal=4*r;
8  printf('%0.6f %0.6f\n',ThMax,TauReal);
9  Th=xi(1:5:2*iz,1)';
10 x=l*sin(Th); y=-l*cos(Th);
11 axis('equal'); grid('on');
12 plot(x,y);
13 print('pend2.eps','-depsc');
    
```

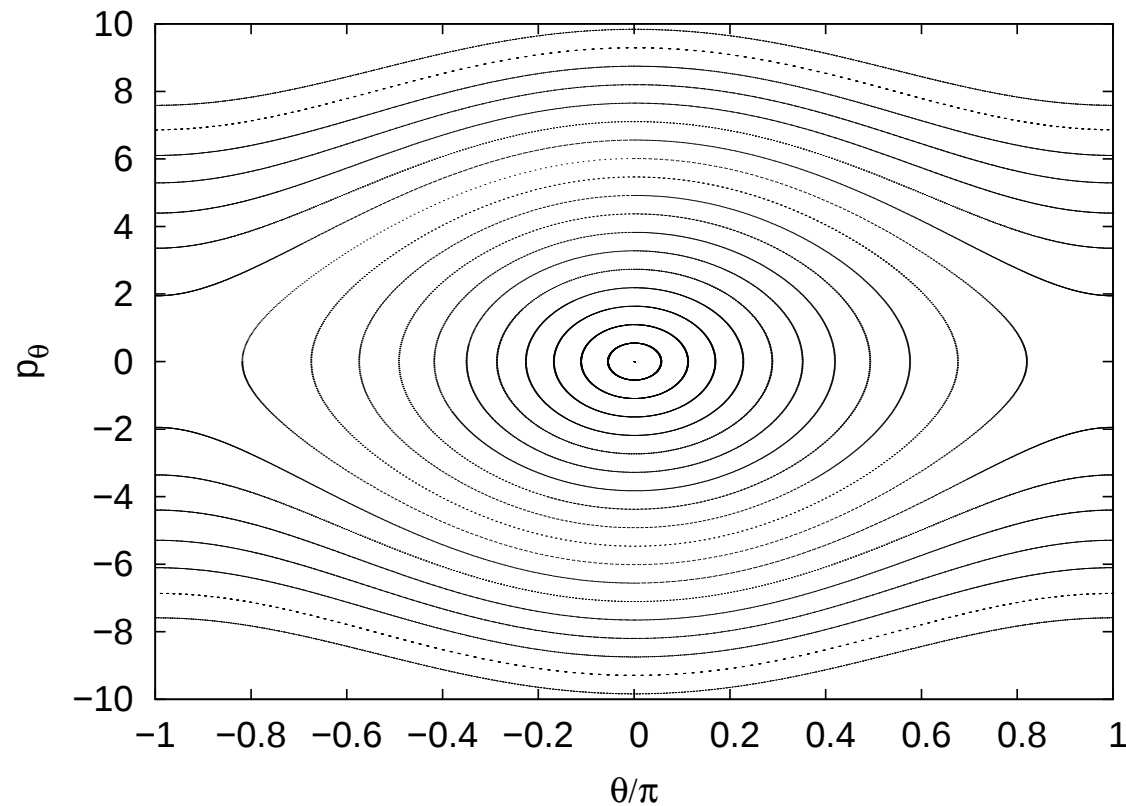


El movimiento es periódico, como debería, tanto en el ángulo como en la velocidad. En los extremos de la elongación la velocidad es nula (el péndulo se detiene). Por el contrario, el movimiento más veloz ocurre para una elongación nula.

Al representar la trayectoria hemos dibujado sólo media oscilación y hemos reducido el número de puntos para que se aprecie cómo el péndulo aparece concentrado en los extremos.



Al aumentar el ángulo máximo de oscilación, y por tanto la energía, el período del péndulo disminuye, alejándose del período ideal galileano $\tau = 2\pi\sqrt{g/l}$.



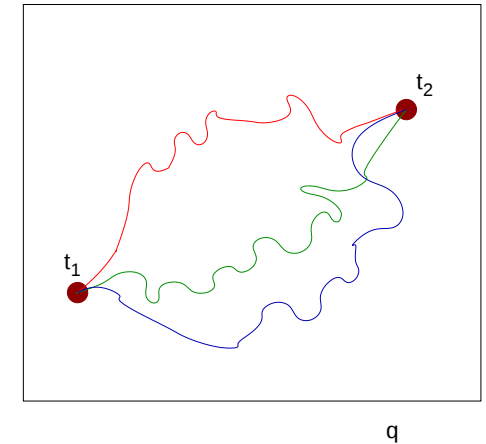
El espacio de fases tiene por coordenadas θ y el momento asociado $p_\theta = \partial L / \partial \dot{\theta} = ml^2 \dot{\theta}$. Cada trayectoria en este espacio de fases representa el movimiento del sistema para una energía dada. Existen dos tipos de trayectorias. Las cerradas corresponden a las oscilaciones incompletas del péndulo. Las abiertas, en cambio, tienen suficiente energía para completar una rotación.

El principio de acción estacionaria

La trayectoria $\varphi(t) = \{\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)\}$ que recorre un sistema entre dos instantes t_1 y t_2 es la que produce un valor estacionario, es decir, un valor extremo de la acción

$$S[\varphi(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt \quad (14)$$

donde los extremos de la trayectoria, $\varphi(t_1)$ y $\varphi(t_2)$, están fijados de antemano y L es la lagrangiana del sistema.



Trayectorias en el espacio de fases.

Como vemos, la acción es un funcional, es decir, se trata de una función de la trayectoria o camino, que a su vez es una función. La trayectoria que el sistema sigue es tal que cualquier modificación de la misma produce un cambio nulo en la acción.

Dm: Sea una pequeña variación de la trayectoria: $\mathbf{q}(t) \rightarrow \mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}(t)$, donde $\delta\mathbf{q}(t_1) = \delta\mathbf{q}(t_2) = 0$ para que los puntos extremos sean fijos. El cambio en la acción es:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \delta L dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt \quad (15)$$

integrando por partes el segundo sumando

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt + \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} \quad (16)$$

pero el último término es nulo debido a que δq_i se anula en los extremos de la trayectoria. Por otra parte, $\delta S = 0$ para cualquier variación $\delta q_i(t)$, lo que sólo puede cumplirse si el término contenido entre paréntesis es nulo, es decir, si

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \quad \text{para todo } i = 1, \dots, m \quad (17)$$

que no son sino las ecuaciones de Lagrange.

El principio de acción estacionaria, a veces llamado principio de mínima acción, es quizás el resultado más fundamental de toda la mecánica. De hecho, *todas las leyes fundamentales de la física se pueden escribir en forma de un principio de acción estacionaria*. Esto incluye el electromagnetismo, la relatividad general, y el modelo estándar de la física de partículas. En 1948 Richard Feynman utilizó una versión del principio de mínima acción para crear una formulación alternativa de la mecánica cuántica. En esta formulación, una partícula recorre todos los posibles caminos con una probabilidad $e^{iS/\hbar}$ determinada por la acción S .

Las ecuaciones de Hamilton (1833)

En un sistema con N coordenadas generalizadas $\{q_i\}_{i=1..N}$, cada coordenada se asocia con un momento generalizado $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$. El comportamiento dinámico está controlado por el Hamiltoniano

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t). \quad (18)$$

En un sistema conservativo $H = T + V$, donde $T = \sum_i p_i^2 / 2m_i$ es la energía cinética, V la potencial, y H es la energía total. Las ecuaciones que gobiernan el sistema son:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (i = 1 \cdots N). \quad (19)$$

En un sistema con N grados de libertad, las ecuaciones de Hamilton forman un conjunto de $2N$ ecuaciones diferenciales de primer orden. Mientras que L es función de las coordenadas de posición, velocidades y tiempo, $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$, H depende de posiciones y momentos: $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$. H es, por tanto, una transformación de Legendre de L , equivalente a las transformaciones que relacionan entre sí los diferentes potenciales termodinámicos.

Deducción de las ecuaciones de Hamilton

A partir de $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$, podemos escribir

$$dL = \frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) = \frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_i (\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i) \quad (20)$$

donde hemos usado $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$ y la ecuación de Lagrange $\partial L / \partial q_i = (d/dt) \partial L / \partial \dot{q}_i = \dot{p}_i$.

Dada la definición del H :

$$dH = d \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right) = \cdots = \sum_i (-\dot{p}_i dq_i + \dot{q}_i dp_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (21)$$

Por otra parte, a partir de la dependencia $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ podemos escribir:

$$dH = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (22)$$

Ambas expresiones de dH deben ser ciertas para variaciones arbitrarias de todas las variables, de manera que podemos identificar los términos que acompañan a cada diferencial:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (23)$$

El resultado son, como vemos, las ecuaciones de Hamilton.

Corchetes de Poisson

Dadas dos propiedades f y g definidas en el espacio de fases $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, se define el corchete de Poisson $\{f, g\}$ como

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right). \quad (24)$$

Es inmediato observar que $\{g, f\} = -\{f, g\}$. El examen de expresiones como $\{f + g, h\}$ o $\{fg, h\}$ se deja como ejercicio.

La utilidad de los corchetes de Poisson nace de la siguiente relación. Dada una dependencia $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ podemos escribir:

$$\frac{df}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \underbrace{\dot{q}_i}_{\partial H / \partial p_i} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \underbrace{\dot{p}_i}_{-\partial H / \partial q_i} \right) + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (25)$$

y, por tanto:

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (26)$$

Una consecuencia inmediata de esta expresión es que si f no tiene una dependencia explícita del tiempo ($\partial f / \partial t = 0$) y si f *conmuta* con el hamiltoniano ($\{f, H\} = 0$), f no varía con el tiempo y es, por lo tanto, una *constante de movimiento*.

Ej: movimiento en el potencial gravitatorio de una colección aleatoria de masas fijas

Una bolita de masa m se desliza sin rozamiento sometida a la atracción de una colección de masas inmóviles (masa M_i situada en $\mathbf{R}_i$). La posición, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{0}$, y velocidad inicial, v_0 , de la bolita están fijadas, pero examinaremos el efecto de diferentes ángulos de lanzamiento. El problema será en 2D para ilustrar fácilmente los resultados.

Potencial gravitatorio:
$$V(\mathbf{r}) = \sum_i V_i(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{-mM_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} = - \sum_i mM_i [(x-X_i)^2 + (y-Y_i)^2]^{-1/2}$$

Gradiente del potencial:
$$V'_x = \sum_i mM_i(x - X_i) [(x - X_i)^2 + (y - Y_i)^2]^{-3/2}, \dots$$

Energía cinética:
$$T(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$$

Ecuaciones de Hamilton:
$$\dot{x} = \frac{p_x}{m}, \quad \dot{y} = \frac{p_y}{m}, \quad \dot{p}_x = -V'_x, \quad \dot{p}_y = -V'_y.$$

Integración numérica de las ecuaciones de Hamilton:

$$\boldsymbol{\xi} = [x, y, p_x, p_y], \quad \dot{\boldsymbol{\xi}} = [\xi_3/m, \xi_4/m, -V'_x, -V'_y], \quad \boldsymbol{\xi}_0 = [0, 0, mv_0 \cos \alpha, mv_0 \sin \alpha].$$

Usaremos `lsode()` para integrar el sistema de ecuaciones diferenciales. La disposición aleatoria de masas será resultado de llamadas a `rand()`. Una primera llamada `rand("seed", pi)` fijará la semilla inicial para que el cálculo se pueda repetir. La rutina `contour()` nos permitirá dibujar un mapa de líneas de contorno del potencial, sobre el que dibujaremos cada trayectoria. Crearemos rutinas específicas para calcular el potencial y su gradiente.

```

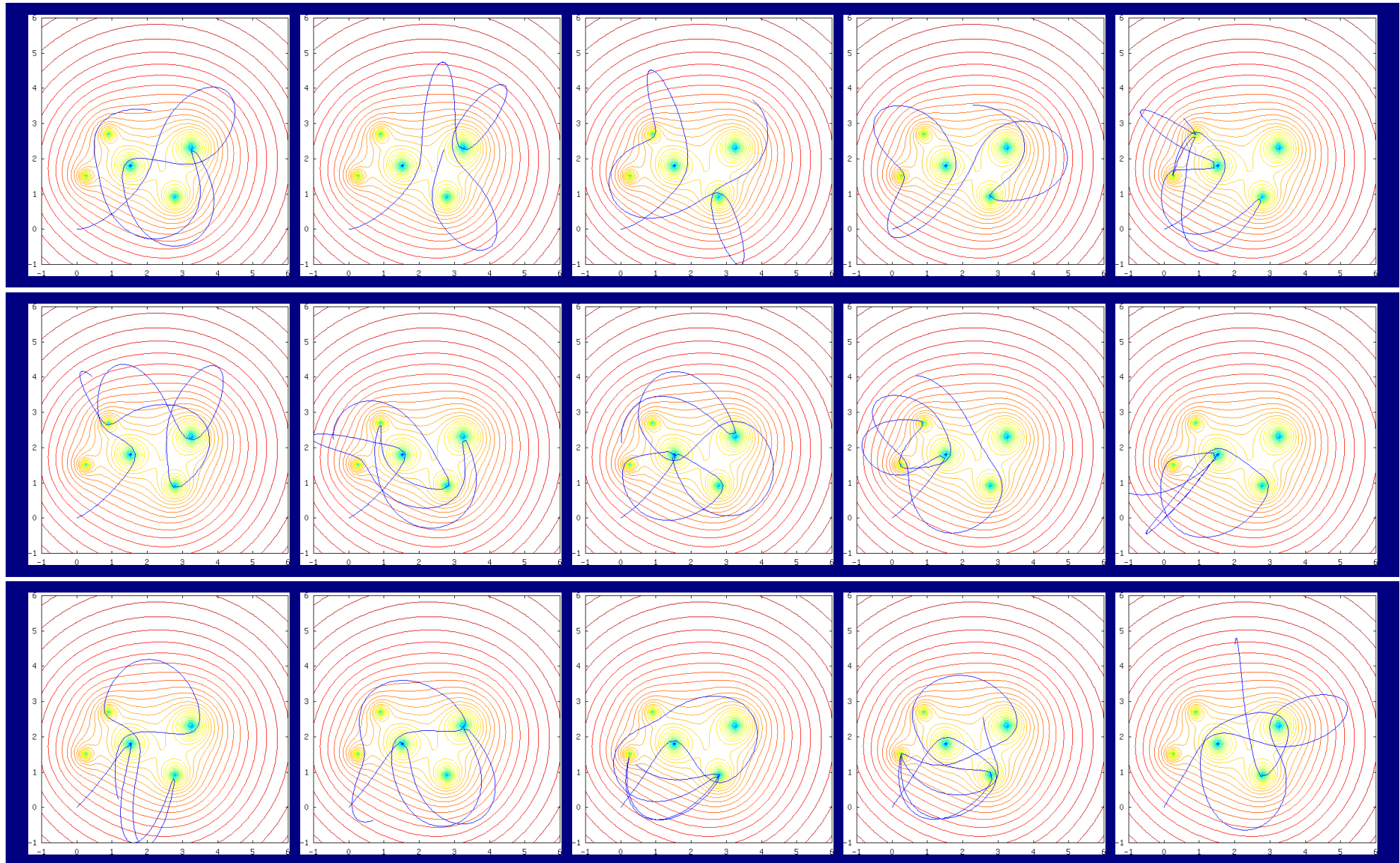
1  function val = potential(x,y)
2      global N rmass rpos m
3      val = zeros(size(x));
4      for k = 1:N
5          r = sqrt((x.-rpos(k,1)).**2.+(y.-rpos(k,2)).**2);
6          val = val .- m .* rmass(k) ./ r;
7      endfor
8  endfunction
9  function [gx,gy] = grad_potential(x,y)
10     global N rmass rpos m
11     gx = zeros(size(x));
12     gy = zeros(size(y));
13     for k = 1:N
14         rr3 = ((x.-rpos(k,1)).**2.+(y.-rpos(k,2)).**2).**(-1.5);
15         gx = gx .+ m .* rmass(k) .* (x.-rpos(k,1)) .* rr3;
16         gy = gy .+ m .* rmass(k) .* (y.-rpos(k,2)) .* rr3;
17     endfor
18 endfunction
19 function xidot = hamilton(xi,t)
20     global m
21     [gx,gy] = grad_potential(xi(1),xi(2));
22     xidot(1) = xi(3) ./ m;
23     xidot(2) = xi(4) ./ m;
24     xidot(3) = -gx;
25     xidot(4) = -gy;
26 endfunction

```

```

27 global N rmass rpos m
28 N = 5; L = 5.0; max_mass = 5; m = 1; rand("seed",2*pi);
29 for k = 1 : N
30     rmass(k) = max_mass * rand; rpos(k,1:2) = L .* rand(1,2);
31 endfor
32 Lgrid = linspace(-1,L+1,101);
33 [xx,yy] = meshgrid(Lgrid,Lgrid);
34 V = -log(-potential(xx,yy));
35 Vmin=min(min(V)); Vmax=max(max(V)); Vstep=(Vmax-Vmin)/50;
36 axis([-1,L+1,-1,L+1],'square');
37 contour(xx,yy,V,Vmin:Vstep:Vmax);
38 print("contour2.png", "-dpng");
39
40 nalfa=21; alfa0=0; alfa1=90; alfas=(alfa1-alfa0)/(nalfa-1);
41 v0 = 1.0; t = linspace(0.0, 10.0, 401);
42 for k = 1 : nalfa
43     alfa = (alfa0 + alfas * (k-1)) * pi / 180;
44     xi0 = [0.0, 0.0, m*v0*cos(alfa), m*v0*sin(alfa)];
45     xi = lsode('hamilton', xi0, t);
46     outfile = sprintf("trayec%02d.png", k); hold on;
47     axis([-1,L+1,-1,L+1],'square');
48     contour(xx,yy,V,Vmin:Vstep:Vmax);
49     plot(xi(:,1), xi(:,2));
50     print(outfile, "-dpng");
51     clearplot; hold off;
52 endfor

```



La única diferencia entre todas estas trayectorias es el ángulo inicial en el que es lanzada la bolita testigo.