

MECÁNICA CLÁSICA EN EL ESPACIO DE HILBERT

I. M. GARRIDO

Facultad de Ciencias. Zaragoza

S U M M A R Y

We continue our study of classical mechanics using the methods of quantum mechanics. A Hilbert space is introduced, new conservation laws deduced, and the possibility of representing by new methods the many body classical problem discussed.

INTRODUCCIÓN

Hace tiempo, Dirac dijo que la mecánica cuántica podía encontrar una explicación científica a gran parte de los fenómenos físicos y a la totalidad de los procesos químicos. Quizá podamos incluir también hoy en día toda la biología entre las ciencias susceptibles de hallar sus fundamentos en las hipótesis cuánticas. En efecto, la existencia de cierto orden estructural, bien del tipo espacial como ocurre con las moléculas de proteínas, o bien topológico cual se encuentra en las interconexiones de algunas células nerviosas, caracteriza los procesos biológicos. En ellos aparece siempre una cierta ordenación de carácter muy estable y que puede ser reproducida. Durante los últimos años hemos descubierto en los fenómenos vivos más elementales mecanismos de reproducción y mantenimiento susceptibles de una interpretación por medio de los conceptos de la Física Cuántica.

Los postulados fundamentales de la mecánica cuántica fueron formulados hace más de treinta años. La física del siglo XIX sólo conocía la mecánica clásica. Pero tan extrañas como parecían a los investigadores de entonces las ideas cuánticas, aparecen hoy las mismas a los ojos de la nueva generación de científicos que ha crecido desde aquellos días. El paso de la mecánica clásica a la cuántica

sorprende a quienes estudian esta última por las profundas nuevas concepciones de la realidad en ella contenidas. No suele presentarse la mecánica cuántica como una continuación lógica del dominio clásico ; no parece que este paso de una a otra sea fácil de hacer. A lo sumo se nos hace ver en qué casos las ecuaciones del dominio clásico se obtienen de sus correspondientes en la mecánica cuántica.

Investigadores jóvenes dudan la validez de los principios básicos de la mecánica cuántica y tratan de hacer otra mejor ; la situación para ellos es incluso más extraña que para quienes tuvieron que luchar con estos problemas por primera vez ya que las dificultades con que tropezaron quienes enunciaron los postulados de la mecánica cuántica no son tan vivas en los nuevos investigadores los cuales encuentran una tarea terminada, un conjunto de ideas difíciles de entender.

Toda mecánica contiene dos clases de principios que describen respectivamente la cinemática y la dinámica de la misma. La cinemática cuántica tuvo que resolver la aparente contradicción que nacía de la necesidad de considerar los sistemas físicos que estudia bajo los aspectos contradictorios de partículas y de ondas. La solución de este problema recibió su formulación final de Bohr, mediante el llamado principio de complementariedad. Según L. Rosenfeld, llamamos principio de complementariedad al nuevo instrumento lógico que liga conceptos que se excluyen mutuamente y que no pueden, por consiguiente, ser aplicados al mismo tiempo porque son contradictorios, aunque, en verdad, ambos son necesarios para obtener una descripción completa de la realidad física. Y así para evitar los errores que nacen al utilizar sin cuidado tales conceptos contradictorios — los de partícula y de onda — hemos de delimitar claramente sus dominios de validez. El principio de incertidumbre expresa las restricciones con que podemos utilizar ambos puntos de vista. Tal principio es el precio que pagamos por intentar describir fenómenos físicos mediante conceptos contradictorios, pero simultáneamente hemos de observar que el mecanismo lógico contenido en el principio de complementariedad implica una ampliación considerable de los medios humanos para describir los fenómenos naturales. Mientras que la física de los siglos precedentes se rige por un sistema lógico estrecho, del cual es pieza fundamental el principio de contradicción, los fenómenos cuánticos establecen una conexión entre varios conceptos contradictorios mediante el principio de complementariedad.

Además del avance lógico que acabamos de describir someramen-

te, la cinemática cuántica mina las bases del principio de determinismo que había inspirado toda la física clásica. Para quienes han educado su inteligencia a pensar sobre la naturaleza bajo la luz de leyes rígidas, deterministas, el concepto de probabilidad que utiliza la mecánica cuántica para su estudio del microcosmos, tiene el carácter de algo incompleto, algo que se utiliza por carecer de una estructura mejor, algo que será superado. Sin embargo un examen imparcial del mundo que nos rodea, nos hace concebir la sospecha de que el determinismo rígido es una ficción, una extrapolación no claramente justificada, de nuestra observación de la naturaleza. Y así, el principio de causalidad moderado por el concepto de probabilidad es a nuestro parecer más apropiado, mejor adaptado, para describir nuestras observaciones de la naturaleza que un determinismo rígido.

Independientemente de las ideas que constituyen el fundamento de la parte cinemática de la mecánica cuántica, esta contiene una serie de principios para construir su dinámica, principios formulados en relación estrecha con la mecánica clásica. Y es esta relación la que queremos poner en evidencia con más claridad que hasta ahora ha sido hecho en el presente trabajo.

Pretendemos desarrollar la dinámica clásica con el mismo aparato matemático que la cuántica, es decir, por medio de operadores en un espacio de Hilbert que construiremos inmediatamente. Los elementos de este espacio de Hilbert no tendrán interpretación física pues aunque ambas mecánicas aparecerán con dinámicas idénticas formalmente, sus cinemáticas no tendrán relación común alguna. No podemos introducir ni el principio de complementariedad ni el concepto de probabilidad en la cinemática clásica la cual es rígidamente determinista. Por esto las cinemáticas clásica y cuántica tienen distinta interpretación y no es fácil establecer una relación entre ellas.

Un sistema sometido a la acción de ciertas fuerzas evoluciona de una manera perfectamente definida. La dinámica — tanto cuántica como clásica — estudia la relación existente entre la acción a que sometemos el sistema y la evolución física del mismo. Cuando realizamos una medición de las propiedades del sistema cuántico en un instante de tiempo, el sistema sufre modificaciones que no podemos conocer; la cinemática cuántica no es determinista ya que no dice *con certeza* lo que espera encontrar en la realidad física. Sin embargo tanto la dinámica clásica como la cuántica son deterministas. Con esto afirmamos la existencia de ecuaciones que relacionan unívocamente las propiedades del sistema en dos instantes de tiempo cualquiera.

Tal principio de determinismo dinámico implica causalidad dinámica. De él deducimos también que dada una cierta acción que actúa sobre el sistema, podemos considerar el concepto de evolución independientemente del sistema que evoluciona, es decir, que la evolución estará determinada completamente por las fuerzas que actúan sobre el sistema y no condicionada por las propiedades particulares del mismo.

Basándonos en este hecho fundamental de que tanto la dinámica cuántica como la clásica son deterministas, pretendemos desarrollar la dinámica clásica a imagen y semejanza de la cuántica. Además de obtener para el dominio clásico la imagen de interacción que permite resolver gran número de problemas de perturbaciones y que ha sido desarrollada ampliamente en trabajos precedentes [1, 2, 3], uno de los resultados más notables de esta investigación es la obtención de nuevas leyes de conservación de los sistemas clásicos que, siendo originadas por las mismas invariancias que las que producen la conservación de energía, momento lineal y momento angular, son, sin embargo, independientes de estas. Son, en verdad, nuevas leyes de conservación de los sistemas clásicos cuyo significado físico es oscuro.

La mayor transcendencia de este desarrollo de la mecánica clásica en el espacio de Hilbert, es que permite trasladar las técnicas particulares introducidas en la mecánica cuántica al dominio clásico. Nos referimos, por ejemplo, a los diagramas de Feynman y al método de operadores de creación y de aniquilación de Fock que tantas aplicaciones tiene para el problema de muchos cuerpos en mecánica cuántica. Al final de esta investigación indicaremos como podemos introducir tales operadores al estudiar la evolución de la función de distribución de la mecánica estadística.

Quedará sin explicar el sentido físico de las nuevas leyes de conservación. Pero dejamos este importante punto para otra investigación posterior.

INTRODUCCIÓN MATEMÁTICA

En trabajos precedentes publicados ya [1] [4] y en otros que aparecerán pronto [3] [2] [5] hemos presentado un desarrollo operacional de la mecánica clásica que nos permitía obtener una imagen de interacción de la misma y, por consiguiente, un tratamiento de la teoría de perturbaciones en el dominio clásico, susceptible de dar excelen-

tes resultados en el estudio de la mecánica celeste y del plasma termonuclear. Así, por ejemplo, hemos podido presentar una teoría general de los invariantes adiabáticos en mecánica clásica e incluso aproximar el error que se comete cuando estos invariantes son considerados constantes exactas del movimiento.

Pretendemos ahora modificar ligeramente aquellos resultados para hacer que los operadores que generan la evolución temporal de los sistemas clásicos, sean hermiticos en un espacio de Hilbert convenientemente definido, representar los mismos operadores por medio de matrices y, principalmente, estudiar las nuevas leyes de conservación que, teniendo una gran semejanza con las de la mecánica cuántica, son el genuino resultado de este estudio. Tales leyes de conservación son producidas por las mismas simetrías de donde nace la conservación de momento lineal, energía, momento angular, ... pero son esencialmente distintas de ellas.

Recordemos algunas definiciones matemáticas que vamos a utilizar inmediatamente [6]. Sea L^0 un operador diferencial lineal definido en un volumen V de variables independientes, volumen que en nuestro caso es el espacio de fase de la mecánica clásica. El problema de valores propios l_i y funciones propias ϕ_i , se plantea así

$$L^0 \phi_i = l_i \phi_i \quad (1)$$

cuando damos las condiciones B en el contorno de V que definen tal problema. Suponemos que el conjunto de funciones $\{\phi_i\}$ cubren todo el espacio V ; en nuestro caso, pues, cualquier función de los puntos del espacio fase puede ser desarrollada en una serie lineal en las funciones ortonormales $\{\phi_i\}$. Definimos el operador adjunto L^{0+} , y las correspondientes condiciones de contorno B^+ a partir de L^0 y de B mediante la relación

$$\int_V f L^{0+} f^+ = \int_V f^+ L^0 f \quad (2)$$

cuando f y f^+ sean funciones que satisfagan B y B^+ respectivamente. Si cuando elegimos $B = B^+$ resulta $L^0 = L^{0+}$ el problema de valores propios caracterizado por L y por B es autoadjunto.

El problema de valores propios correspondiente al operador adjunto L^{0+}

$$L^{0+} \phi_i^+ = l_i^+ \phi_i^+ \quad (3)$$

tiene los mismos valores propios $l_i = l_i^+$ y los conjuntos, $\{\phi_i\}$ y $\{\phi_i^+\}$,

de funciones propias son biortonormales, es decir, cada función de un conjunto es ortogonal a cada miembro del otro conjunto excepto a las que pertenecen al mismo valor propios.

Los operadores L^o pueden ser representados por medio de una matriz si tomamos dos bases ortogonales $\{\psi_\alpha\}$ y $\{\psi_\beta^+\}$ de V que satisfagan las condiciones B y B^+ respectivamente. Los elementos de matriz de esta matriz infinita son

$$L^o_{\alpha\beta} = \int_V \psi_\alpha^+ L^o \psi_\beta \quad (4)$$

De la misma forma una función ϕ de los puntos de V puede ser representada en estas bases mediante las funciones de onda ψ_α por medio del desarrollo

$$\phi = \sum_\beta \psi_\beta A_\beta \quad (5)$$

donde A_β son coeficientes que se calculan inmediatamente teniendo en cuenta las propiedades de ortonormalidad de las bases.

OPERADORES

Presentemos ahora el método general para construir operadores autoadjuntos que forman parte del desarrollo operacional de la mecánica clásica. Como hemos dicho, el volumen V es el espacio de fase del sistema que estudiamos. A fin de simplificar nuestros cálculos nos limitaremos a un sistema que posea un solo grado de libertad; su espacio de fase tiene sólo dos dimensiones correspondientes a la coordenada q y al momento p .

Consideremos un atributo $L = L(q, p)$ del sistema físico. Puede ser el hamiltoniano el cual corresponde a la energía del sistema o el momento lineal o angular del mismo. Dado su carácter físico será una función real de q y de p . A partir de él, podemos formar el siguiente operador diferencial.

$$L^o \equiv i \left(\frac{\partial L}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad (6)$$

donde i es la unidad imaginaria. El dominio de los operadores L^o es el conjunto de funciones del espacio de fase que forman un espacio de Hilbert. Sus funciones propias (1) serán, en general, funciones complejas de los puntos de V

$$\phi_i = \phi_i(q, p) \quad (7)$$

Los elementos de matriz de L^0 entre dos funciones complejas $\psi_\alpha(q, p)$ y $\psi_\beta(q, p)$ que figuren entre las que forman las bases de una representación cualquiera son

$$L^0_{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha | L^0 | \psi_\beta \rangle = \int \psi_\alpha^*(q, p) L^0 \psi_\beta(q, p) dq dp \quad (8)$$

donde * indica complejo conjugado; la integral se extiende a todo el volumen de fase. Las condiciones de contorno $B = B^+$ que tomamos son la anulación de todas las $\{\psi_\alpha\}$ en los contornos de V , es decir, para $p \rightarrow \pm \infty$ o para $q \rightarrow \pm \infty$. Con estas condiciones y teniendo en cuenta que $L(q, p)$ es real, es fácil demostrar que

$$\langle \psi_\alpha | L^0 | \psi_\beta \rangle = \langle \psi_\beta | L^0 | \psi_\alpha \rangle^* \quad (9)$$

mediante sencillas integraciones por partes, lo cual implica que L^0 es autoadjunto. En algunos casos habrá que tomar otras condiciones de contorno. Los elementos diagonales de L^0 en cualquier representación son reales. Si en particular tomamos las funciones propias ϕ_i de (6) como base de la representación, tenemos

$$\langle \phi_i | L^0 | \phi_i \rangle = l_i \langle \phi_i | \phi_i \rangle \quad (10)$$

y puesto que $\langle \phi_i | \phi_i \rangle$ es real, llegamos a la conclusión de que los valores propios l_i de los operadores construidos de acuerdo con (6) son reales.

El operador L^0 puede ser escrito simbólicamente así

$$L^0 = L I \quad (11)$$

cuando I se define mediante la siguiente expresión

$$I = i \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \right) \quad (12)$$

donde el significado de los símbolos es obvio. La expresión (11) es simbólica pues los operadores $\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}$, $\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}$ no deben actuar en la misma más que sobre L y no en cualquier otra función de q y de p que multiplique (11) por la izquierda. Sin embargo tal forma de escribir L^0 aclara cuales son las propiedades de transformación de L^0 bajo transformaciones canónicas. Puesto que I de (12) es un invariante bajo transformaciones canónicas según hemos expuesto anteriormente [2] — en realidad este es el contenido de la bien conocida invariancia del paréntesis de Poisson — la expresión (11) indica que L^0 tendrá las mismas propiedades de transformación que L bajo una transfor-

mación canónica. Así, por ejemplo, puesto que la evolución temporal es una transformación canónica, si el hamiltoniano del sistema H no depende explícitamente del tiempo, el operador H^0 de él deducido, tampoco dependerá explícitamente del tiempo. Más adelante veremos la gran importancia de este hecho para deducir nuevas leyes de conservación.

En la mecánica cuántica, tienen un papel muy importante el conjunto completo de observables compatibles que son los operadores que conmutando entre sí son suficientes para describir los estados dinámicos de nuestro sistema; por conmutar entre sí tienen funciones propias simultáneas para todos ellos. Veamos ahora en qué condiciones dos operadores L_1^0 y L_2^0 conmutan. Mediante cálculos sencillos de realizar, aunque largos, obtenemos que el conmutador de L_1^0 y L_2^0 es

$$[L_1^0, L_2^0] \equiv L_1^0 L_2^0 - L_2^0 L_1^0 = \frac{\partial \{L_1, L_2\}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial \{L_1, L_2\}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \quad (13)$$

donde $\{L_1, L_2\}$ es el paréntesis de Poisson de L_1 y de L_2 .

$$\{L_1, L_2\} = \frac{\partial L_1}{\partial p} \frac{\partial L_2}{\partial q} - \frac{\partial L_2}{\partial q} \frac{\partial L_1}{\partial p} \quad (14)$$

Por consiguiente los operadores L_1^0 y L_2^0 conmutan cuando los atributos L_1 y L_2 de los que fueron originados tienen su paréntesis de Poisson igual a una constante independiente de las variables q y p , y, en particular, cuando su paréntesis de Poisson es nulo.

GENERADORES

Sea A una cantidad que depende de pares de variables canónicas conjugadas.

$$A = A(q, p) \quad (15)$$

Llamamos operador generador o generador de los incrementos de esa cantidad respecto a la variable q , al operador G_q definido por medio de

$$i \delta_q A = \delta_q [G_q, A] \quad (16)$$

donde $[]$ es el conmutador de las cantidades contenidas.

El operador generador G_q con respecto a la coordenada q es π^0

$$G_q = \pi^0 \quad (17)$$

o sea el operador obtenido de acuerdo con la fórmula simbólica (11) a partir del momento π canónico conjugado de la coordenada q . En

efecto, el operador doble I , según la conocida invariancia de los paréntesis de Poisson en relación a una transformación canónica, puede ser escrito de la forma siguiente

$$I = i \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \pi} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial \pi} \right)$$

lo cual inmediatamente da $G_q = i \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q}$ que evidentemente satisface la relación (16). El álgebra y propiedades de los operadores diferenciales fue presentada en otro trabajo [3].

Recíprocamente es inmediato demostrar que

$$G_\pi = -q^0 \quad (18)$$

Podemos aplicar esta teoría a la evolución dinámica en el tiempo y calcular $i\delta_t A$ por medio del generador G_t de las variaciones temporales que según esta teoría es

$$G_t = H^0 \quad (19)$$

puesto que el momento canónico conjugado del tiempo, salvedad hecha del signo, es el hamiltoniano. Consiguientemente la ecuación del movimiento de A es

$$i \frac{\delta A}{\delta t} = \frac{dA}{dt} - \frac{\partial A}{\partial t} = [H^0, A] \quad (20)$$

donde $\frac{dA}{dt}$ es la derivada total mientras que $\frac{\partial A}{\partial t}$ es la parcial que no es nula solamente cuando A depende explícitamente del tiempo.

Estudiaremos ahora el carácter aditivo de estos operadores. En general un atributo de un sistema — energía, momento lineal, momento angular, — recibe el nombre de aditivo si su valor para un sistema formado por un conjunto de subsistemas que no interaccionan entre sí, es igual a la suma de los valores de estos atributos para cada subsistema. Supongamos que el par de variables q_j, p_j canónicas conjugadas es suficiente para determinar el estado de cada subsistema que forma parte de un determinado sistema. La variable j numera los subsistemas. El hamiltoniano, o en general cualquier atributo aditivo es la suma de los hamiltonianos de cada subsistema

$$H = \sum_j H_j(q_j, p_j) \quad (21)$$

suma extendida a todos los subsistemas del sistema.

Simultáneamente, puesto que cada subsistema es cinemáticamente independiente del resto de los subsistemas del sistema, se tiene

$$I = \sum_j I_j \quad (22)$$

donde

$$I_j = i \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \overleftarrow{p}_j} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q_j} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q_j} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial \overleftarrow{p}_j} \right) \quad (23)$$

se verifica

$$H^0 = \sum_j H_j^0 \quad (24)$$

donde H_j^0 es el operador hamiltoniano correspondiente al subsistema j

$$H_j^0 = i \left\{ \frac{\partial H_j(q_j, p_j)}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q_j} - \frac{\partial H_j(q_j, p_j)}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right\} \quad (25)$$

En general, pues, se verifica que si los atributos son aditivos, los operadores correspondientes también lo son, si los subsistemas son cinemáticamente independientes. Esta propiedad es de gran importancia para la introducción de operadores de creación o aniquilación.

DINÁMICA CLÁSICA

En el caso más general la función hamiltoniana de un sistema es función explícita del tiempo $H = H(q, p, t)$. Sea $A(q, p)$ una función del grupo canónico de variables conjugadas que no depende explícitamente del tiempo. El operador hamiltoniano H^0 , también llamado de Liouville, será función explícita del tiempo si lo es H .

Llamemos $S(t)$ al operador que genera la evolución dinámica del sistema, es decir, el operador que conecta unitariamente el valor de $q = q(t)$, $p = p(t)$ en un instante de tiempo con sus valores iniciales.

$$q_0 = q(0) \quad p_0 = p(0) \quad (26)$$

Entonces podremos expresar tanto el atributo A como el operador H^0 en función de sus valores antes de la evolución dinámica

$$A(q(t), p(t)) = S(t) A(q_0, p_0) S^{-1}(t) \quad (27)$$

$$H^0(q(t), p(t)) = S(t) H^0(q_0, p_0, t) S^{-1}(t) \quad (28)$$

Derivando respecto al tiempo esta expresión operacional para $A(q(t), p(t))$ y comparando este resultado con (20), obtenemos la siguiente ecuación para $S(t)$.

$$i \frac{\delta S(t)}{\delta t} = S(t) H^0(q_0, p_0, t) \quad (29)$$

con la condición de contorno $S(0) = 1$. Si como caso particular suponemos que la hamiltoniana del sistema no depende explícitamente del tiempo, H^0 tampoco depende explícitamente del tiempo y la última ecuación tiene por solución inmediata

$$S(t) = e^{-it H^0} \quad (30)$$

que es un operador unitario. Las aplicaciones más importantes de este desarrollo se originan cuando la hamiltoniana puede ser dividida en dos partes, una no perturbada H_0 , y, la perturbación H_1 , donde tanto H_0 como H_1 pueden depender del tiempo explícitamente y las ecuaciones de la evolución temporal, engendrada por H_0 han sido resueltas exactamente, es decir, se han hallado las funciones $q_0(t)$ y $p_0(t)$ para el movimiento del sistema cuya hamiltoniana es H_0 a partir de las mismas condiciones iniciales $q_0(0) = q_0$ y $p_0(0) = p_0$. La evolución perturbada del atributo A la escribimos así

$$A(q(t), p(t)) = S_1(t) A(q_0(t), p_0(t)) S_1^{-1}(t) \quad (31)$$

donde $A(q_0(t), p_0(t))$ es una función conocida que es lo que queremos decir al exigir que el movimiento no perturbado estuviera resuelto. De esta forma obtenemos una teoría general de perturbaciones en mecánica clásica. En efecto el operador S_1 satisface la siguiente ecuación integral:

$$S_1(t) = 1 - i \int_0^t dt_1 S_1(t_1) H_1^0(q_0(t_1), p_0(t_1), t_1) \quad (32)$$

que puede resolverse por iteración en potencias de H_1^0 , que es el operador de perturbación que suponemos de efectos pequeños.

Todo lo anterior ha sido expuesto con más detalle en trabajos anteriores. Lo único que nos interesa aquí es recordar la posibilidad de escribir la dinámica clásica por medio de operadores de evolución S , S_0 o S_1 , representados por medio de matrices en un espacio de Hilbert, para lo cual es preciso modificar ligeramente el punto de vista desarrollado hasta ahora. En efecto, según ya indicamos anteriormente [2] la necesidad de escribir el operador $S^{-1}(t)$ en (27) surge de considerar el atributo A como un operador de forma que la ecuación (27) es una ecuación operacional que puede multiplicarse por la derecha y por la izquierda por cualquier función de q y de p . Sin embargo si tal ecuación no hubiera de ser multiplicada miembro a miembro por función alguna de p y q , es decir, si sólo nos interesase el carácter numérico $A(q(t), p(t))$, debemos escribirla así

$$A(q(t), p(t)) = S(t) A(q_0, p_0) \quad (33)$$

Este segundo punto de vista es el que nos interesa desarrollar aquí ahora.

Evidentemente la función $A(q, p)$ corresponde ahora a una función de onda de la mecánica cuántica que, por consiguiente, podrá ser escrita como una combinación lineal de elementos del espacio de Hilbert que formen una base completa y ortonormal. No pretendemos decir aquí que $A(q, p)$ haya de ser interpretado como la amplitud de la probabilidad; tal afirmación implicaría una nueva formulación de la cinemática clásica que, como hemos indicado, no pretendemos variar. Asimilar el atributo A a una función de onda, tiene sentido sólo formalmente para representar mejor el operador $S(t)$ por medio de matrices.

NUEVAS LEYES DE CONSERVACIÓN

Examinaremos ante todo el significado de las leyes de conservación como suelen ser presentadas en la dinámica clásica. Durante el movimiento del sistema mecánico la coordenada q y el momento lineal p varían en el tiempo. Pero podemos encontrar funciones de estas cantidades cuyos valores permanecen constantes durante el movimiento y que, por consiguiente, sólo dependen de las condiciones iniciales del mismo. Tales funciones son llamadas constantes del movimiento. Dinámicamente se caracterizan por no depender explícitamente del tiempo y porque su paréntesis de Poisson con la hamiltoniana del sistema, es nulo.

No todas las constantes del movimiento tienen igual importancia en mecánica. Las constantes del movimiento aditivas — tales que su valor para un sistema formado de varias partes que no interactúan entre sí, es igual a la suma de sus valores para cada parte individual — tienen un profundo significado pues su constancia es consecuencia de la homogeneidad e isotropía del espacio. Y además su carácter aditivo les da una importancia fundamental en mecánica.

Para sistemas formados por partículas libres las constantes del movimiento que son aditivas son la energía, el momento lineal y el momento angular. Veamos a qué simetría del espacio y tiempo corresponden.

Conservación de energía corresponde a homogeneidad del tiempo. Como consecuencia de esta homogeneidad la hamiltoniana H de un sistema cerrado no depende explícitamente del tiempo; el sistema es conservativo. Así pues cuando un estudio de las propiedades del sis-

tema físico muestre que un cambio del origen de tiempo no modifica las condiciones dinámicas del sistema, la energía del mismo es constante del movimiento.

Homogeneidad del espacio en una cierta dirección quiere decir que las propiedades mecánicas de un sistema físico no cambian cuando el sistema sufre un desplazamiento en espacio paralelo a esa dirección. Como consecuencia de esta homogeneidad la componente del momento lineal sobre la citada dirección permanece constante durante el movimiento. Si el espacio fuera homogéneo en cualquier dirección, el vector momento lineal sería constante del movimiento.

Estudiemos ahora cual es la ley de conservación que se obtiene de la isotropía del espacio. Isotropía del espacio alrededor de una dirección determinada quiere decir que las propiedades mecánicas de un sistema cerrado no varían cuando tal sistema como un todo sufre una rotación en el espacio alrededor de esa dirección. Como consecuencia de esta isotropía, la componente del momento angular sobre esta dirección del espacio es constante del movimiento. Si el espacio es isotrópico en cualquier dirección, el vector momento angular es constante del movimiento.

No hay ninguna otra constante del movimiento aditiva.

Ahora bien, todas estas transformaciones — translaciones de tiempo y espacio, rotaciones del espacio — son canónicas y por consiguiente, el operador I es invariante bajo las mismas. Dada la ley de formación de los operadores generadores de las transformaciones infinitesimales que hemos expuesto en el apartado anterior, a esta homogeneidad e isotropía del espacio y del tiempo corresponde también la conservación de los operadores generadores de estas transformaciones, o sea, de sus valores propios. Así por ejemplo la homogeneidad del tiempo — invariancia de las propiedades mecánicas del sistema bajo un cambio del origen de tiempo — implica conservación de la energía, E : la suma de las energías de todas las partes constituyentes del sistema, permanece constante en el movimiento. Pero también implica conservación de los valores propios del operador energía, es decir, de la energía propia definida por

$$H^0 \phi_i = h_i \phi_i \quad (34)$$

$$H^0 = \sum_j H_j^0$$

La cantidad E es la energía mientras que los valores propios de operador hamiltoniano reciben el nombre de energía propia.

Observemos que entre los números E y h_i no hay relación alguna ; y que dimensionalmente su cociente es la acción. La cantidad h_i es la que aparece en mecánica cuántica cuyas leyes de conservación están expresadas por medio de los atributos propios. El cociente entre E y h_i es la constante de Planck en mecánica cuántica mientras que no está fijado en mecánica clásica.

La importancia de estas nuevas leyes de conservación radica en que son completamente independientes de las anteriores aunque siempre se dan simultáneamente y por consiguiente pueden reemplazarlas. Así por ejemplo al estudiar la evolución dinámica de un sistema clásico, basta, por ejemplo, tener en cuenta la conservación de la energía propia h_i en cada instante de la evolución en lugar de conservar la energía del sistema. Pero manejar los atributos propios y representar la dinámica clásica en el espacio de Hilbert nos permite trasladar al dominio clásico muchas de las potentes técnicas de la mecánica cuántica.

I. Prigogine [7] utiliza en su estudio de los procesos irreversibles en mecánica estadística, un caso particular de estas nuevas leyes de conservación. Al hacer la descomposición de Fourier de la función de distribución del conjunto de partículas no hace sino representarla por medio de las funciones propias del operador momento lineal. La importancia principal de este desarrollo de Fourier, nace de la ley de conservación del momento lineal propio — vectores de onda — en las interacciones entre las partes del sistema, lo cual le permite utilizar diagramas con el mismo sentido que los utilizados en mecánica cuántica, aunque con peculiaridades propias del dominio clásico porque aquí los vectores momento lineal y momento lineal propio, son independientes entre sí.

La conservación de los atributos propios simultáneamente con la de los atributos en mecánica clásica puede también ser demostrada por medio de (13). En efecto el paréntesis de Poisson entre una constante de movimiento y el hamiltoniano es cero, lo cual implica que el conmutador entre los operadores hamiltonianos y el operador correspondiente a la constante del movimiento indicado sea cero, y de aquí, como en mecánica cuántica, que los valores propios del operador constante del movimiento sean también constantes en el movimiento.

La conmutación entre el operador hamiltoniano y el de un atributo constante del movimiento implica que el hamiltoniano es invariante bajo la transformación canónica generada por este operador

del atributo. Es decir, las propiedades de homogeneidad e isotropía del espacio y tiempo deben verse reflejadas en la función hamiltoniana la cual implica que las propiedades de invariancia de la hamiltoniana del sistema son las que determinan las constantes del movimiento del sistema.

El problema que aún queda por determinar es el significado físico de los atributos propios. Por ahora basta decir que están íntimamente relacionados con ciertas correlaciones entre las partes del sistema y que su conservación implica la conservación de estas correlaciones.

LA ECUACIÓN DE LIOUVILLE

La ecuación de Liouville que se utiliza en mecánica estadística es

$$i \frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t) + H^0 f(q, p, t) = 0 \quad (35)$$

donde $f(q, p, t)$ es la función de distribución que da la densidad de partículas en un elemento diferencial alrededor del punto q, p del espacio fase en el instante t . Para un sistema de N partículas q representa el conjunto de variables coordenadas de las mismas q_1, q_2, \dots, q_n mientras que p es el conjunto de sus momentos p_1, p_2, \dots, p_n . El operador H^0 es la suma de los operadores H_i^0 , de cada partícula que forma el sistema.

En este apartado la función de distribución es tratada como una función de onda de forma que la anterior ecuación de Liouville es comparada formalmente con la de Schrödinger en imagen de Schrödinger de la mecánica cuántica. Antes de pasar adelante hemos de entender claramente el significado de cada uno de los términos que entran en la misma ecuación.

Así, por ejemplo, $\frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t)$ quiere decir derivada parcial respecto a la dependencia explícita de t en $f(q, p, t)$. Al no ser derivada dinámica, no podemos utilizar sin tomar ciertas precauciones los formalismos generales de nuestra teoría de perturbaciones. Por otra parte, $H^0 f(q, p, t)$ es la derivada dinámica $i \frac{\delta}{\delta t} f(q, p, t)$ de la función de distribución. Como es bien sabido, según esto, la ecuación de Liouville sólo quiere decir que la derivada temporal total de la función de distribución es nula. De hecho las soluciones de la ecuación de Liouville son del siguiente tipo.

$$f(q(t), p(t), t) = f(q, p, 0) \quad (36)$$

donde q_0, p_0 son las posiciones iniciales de las partículas que componen el sistema.

Refirámonos ahora a un punto fijo del espacio fase q, p . Entonces veamos si podemos tomar

$$f(q, p, t) = e^{iH^0 t} f(q, p, 0) \quad (37)$$

para el caso en que H no dependa explícitamente del tiempo. Es fácil comprobar que esta expresión para $f(q, p, t)$ satisface la ecuación de Liouville. Esto nos indica que en el caso general debemos escribir

$$f(q, p, t) = S(t) f(q, p, 0) \quad (38)$$

donde el operador $S(t)$ contiene las variables q, p fijas y además satisface la siguiente ecuación

$$i \frac{\partial S(t)}{\partial t} = -H^0 S(t) \quad S(0) = 1 \quad (39)$$

No olvidemos que en esta última ecuación las variables q y p deben permanecer constantes y que tal ecuación sólo determina la dependencia explícita de S en el tiempo. El operador $S(t)$, aunque teniendo distinto significado que el que utilizamos para problemas no estadísticos, es matemáticamente muy parecido y es susceptible de los mismos tratamientos. Recordemos que, según Kirkwood, la teoría matemática del operador $S(t)$ puede ser formulada de manera rigurosa por los métodos operacionales en el espacio de Hilbert.

Imaginemos, para concretar, que H^0 no dependa explícitamente del tiempo y consideremos un conjunto completo de funciones propias de H^0 .

$$H^0 \phi_i = h_i \phi_i \quad (40)$$

y desarrollaremos ahora la función de distribución $f(q, p, 0)$ en serie por medio de una combinación lineal de las funciones propias $\phi_i(q, p)$.

$$f(q, p, 0) = \sum_i A_i \phi_i(q, p) \quad (41)$$

donde A_i son coeficientes fáciles de calcular dada la ortonormalidad de las ϕ_i

$$A_i = \int \phi_i^*(q, p) f(q, p, 0) dq dp \quad (42)$$

Evidentemente, como es fácil ver, la evolución temporal queda determinada ahora mediante la expresión

$$f(q, p, t) = \sum_k A_k e^{ih_k t} \phi_k(q, p, 0) \quad (43)$$

donde K numera los valores propios del operador energía.

Sería de gran interés que el estado fundamental, es decir, el de menor valor propio de h_i al que llamaremos h_0 fuera el único que apareciera en ciertas condiciones, por ejemplo cuando el sistema estuviera o fuera hacia el equilibrio. Esto querría decir ante todo que los A_j ($j \neq 0$) serían nulos o muy pequeños.

El que así ocurra depende del significado físico de esos valores propios h_i que es el que evidentemente, debemos investigar cuidadosamente.

Supongamos que hayamos investigado el significado físico de h_i , cantidades que están íntimamente relacionadas con las correlaciones entre las partículas que forman el sistema, y que hayamos demostrado que el estado fundamental tiene una excepcional importancia física. Para hallar tal estado podemos utilizar todos los procedimientos de operadores de creación y de aniquilación que se usan en mecánica cuántica así como los gráficos de Feynman.

Como un ejemplo del manejo operacional vamos a deducir la fórmula de Prigogine que ha servido para realizar sus cálculos sobre la teoría de los procesos irreversibles de sólidos y gases. Sus cálculos están basados en la imagen de interacción y en la representación de los operadores que aparecen en un conjunto de bases que no es completo en el espacio fase.

Llamaremos $f[q, p, t]$ la función de distribución en imagen de interacción la cual, si $S_0(t)$ es el operador de evolución libre, se escribe así

$$f(q, p, t) = S_0(t) f[q, p, t] \quad (44)$$

Las ecuaciones que satisfacen estos operadores y función de distribución

$$i \frac{\partial S_0(t)}{\partial t} = H_0^0 S_0(t) \quad (45)$$

donde H_0^0 es el operador del hamiltoniano no perturbado y

$$i \frac{\partial f[q, p, t]}{\partial t} = H_1^0 [t] f[q, p, t] \quad (46)$$

con el significado siguiente

$$H_1^0 [t] = S_0^{-1} (t) H_1^0 S_0(t) \quad (47)$$

siendo H_1^0 , el operador del hamiltoniano de perturbación.

Lo que hemos de hacer ahora es proyectar la ecuación (46) sobre los estados propios de H_0^0 que es independiente del tiempo. Para que

se parezca nuestro cálculo más a la mecánica cuántica escribimos la ecuación de valores propios así

$$H_0^0 |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (48)$$

y además tomamos $f[q, p, t]$ como la función de onda de un estado vector

$$f[q, p, t] \rightarrow |f, t\rangle \quad (49)$$

La proyección de la ecuación (46) sobre estas bases es

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \langle \lambda | f, t \rangle &= \sum_{\lambda'} \langle \lambda | H_1^0[t] | \lambda' \rangle \langle \lambda' | f, t \rangle = \\ &= \sum_{\lambda'} e^{i(\lambda - \lambda')t} \langle \lambda | H_1^0 | \lambda' \rangle \langle \lambda' | f, t \rangle \end{aligned} \quad (50)$$

que es exactamente la utilizada por Prigogine.

En el caso estudiado por Prigogine,

$$H_0^0 = i \sum_k \omega_k \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \quad (51)$$

donde ω_k son las frecuencias propias y α_k son las variables ángulos del movimiento periódico no perturbado que él presenta. Las funciones propias normalizadas (no completas en el espacio de fase) son

$$\varphi_{\{n_k\}}(\alpha_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{N/2}}} \exp(-i \sum_k n_k \alpha_k) \quad (52)$$

por lo cual representar la ecuación (46) en estas bases es trabajar con la transformada de Fourier de la función de distribución que es lo primero que hace Prigogine.

La interpretación física de \hbar_k sale de la fórmula (43). Evidentemente es la frecuencia de aquella oscilación. De la misma forma, los números de onda tienen fácil interpretación cuando consideramos los desarrollos en funciones propias del momento lineal como ondas.

La conexión entre el número de ondas y el momento lineal de la mecánica cuántica es la que permite explicar la dualidad partícula-onda. Tal conexión no existe en el dominio clásico y tampoco la realidad física exige la existencia de la misma.

La teoría de Hamilton-Jacobi demuestra que para sistemas conservativos o sea para aquellos cuyo hamiltoniano es independiente del tiempo, es posible determinar mediante transformaciones canónicas adecuadas, un conjunto de $2N-1$ nuevos momentos $J_i(q, p)$ funciones de las coordenadas y momentos antiguos que además de no de-

penden explícitamente del tiempo son constantes del movimiento. Una constante del movimiento es la ecuación de una cierta hipersuperficie en el espacio de fase $J_i(p, q) = J_i^0$ donde J_i^0 es el valor de tal constante. La trayectoria del sistema mecánico debe estar en tal superficie, y, por consiguiente, debe ser la intersección de las superficies correspondientes a las $2N-1$ constantes del movimiento del sistema cuyo espacio de fase tiene $2N$ dimensiones. La constante del movimiento más importante de un sistema conservativo es el hamiltoniano que genera una superficie en el espacio de las fases llamada superficie ergódica.

La misma teoría de Hamilton-Jacobi nos enseña a calcular otra función J_{2n} , lineal en el tiempo, que fija la velocidad con que el sistema se mueve en la trayectoria. Es preciso observar que esta teoría de Hamilton-Jacobi se puede aplicar a cualquier sistema y que siempre podemos utilizar constantes del movimiento como variables canónicas para describir el movimiento sin que el hacerlo suponga pérdida de generalidad en nuestro estudio. Una versión modificada aunque también posible para todo sistema conservativo y por consiguiente totalmente general, es buscar una transformación canónica que dé nuevos momentos que son constantes del movimiento. Las variables correspondientes son cíclicas y el hamiltoniano es independiente de las mismas. Es preciso observar que esta versión de la teoría de Hamilton-Jacobi no determina los nuevos momentos completamente. Cualquier conjunto de funciones de los nuevos momentos, independientes entre sí, pueden servir de momentos nuevos en la teoría de Hamilton-Jacobi.

Para terminar recordemos que si el hamiltoniano expresado como función de los nuevos momentos constantes del movimiento es una suma de N términos, cada uno de los cuales depende únicamente de un sólo momento, el problema es separable.

Por ejemplo en el caso de un sólido los átomos de su estructura cristalina se hallan muy próximos entre sí y sus interacciones mutuas son fuertes. Sin embargo para temperaturas pequeñas, el potencial de interacción puede ser aproximado por un potencial cuadrático en los desplazamientos de los átomos de su posición de equilibrio — el término canónico — perturbado por unos términos cúbicos. Entonces, según demuestra Peierls, es posible realizar una transformación canónica a las llamadas coordenadas normales. Los términos armónicos del potencial son absorbidos junto con la energía cinética en el nuevo hamiltoniano no perturbado mientras que la contribución anarmónica

es considerada como una pequeña perturbación. Las nuevas variables en que se representa el problema son las variables de acción J_i y las variables ángulo α_i . Para este caso las frecuencias de los modos normales poseen la interesante característica de ser independientes de las variables de acción.

Hemos definido la función de distribución de N partículas $f_N(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N, t)$ como la densidad local del conjunto representativo del sistema en el punto $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$ y en el instante t ; tal función de distribución contiene la máxima información estadística que podemos tener sobre el sistema. Ante todo recordemos que consideramos indistinguibles las partículas del sistema es decir, todas las partículas tienen el mismo cometido dinámico, lo cual implica la simetría de la función de distribución con relación al intercambio de dos partículas.

Recordemos que las cantidades macrocósmicas más importantes son promedios sobre todas las partículas del sistema de funciones dinámicas que sólo dependen de las coordenadas y momentos de un número pequeño de partículas. Por consiguiente conviene introducir las funciones de distribución reducidas mediante

$$f_s(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int_{s+1}^N dq \dots dq \frac{dp \dots dp}{N} f_N \quad (53)$$

donde el factor $\frac{N!}{(N-s)!}$ se introduce por conveniencias de normalización para sistemas formados por partículas indistinguibles.

Imaginamos que nuestro sistema se halla encerrado en una caja de volumen $8\pi^3\Omega$. Tenemos que imponer condiciones de contorno al sistema en la superficie de la caja. Pero si el volumen es muy grande, la influencia de los efectos de superficie sobre los de volumen es muy pequeña y podemos imponer condiciones de contorno más bien artificiales pero que permiten simplificar los cálculos sin modificar el contenido de la teoría. Y así imponemos en la función de distribución las siguientes condiciones de contorno periódicas.

$$f_N(0, 0, \dots, \bar{p}_1, \dots, \bar{p}_N, \dots, t) = f_N(2\pi\Omega^{1/3}, 2\pi\Omega^{1/3}, \dots, p_1, p_2, \dots, p_N, t) \quad (54)$$

función que podemos desarrollar en serie de Fourier según hace Prigogine para el origen de tiempos

$$f_N(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N, \bar{p}_1, \bar{p}_2, \dots, \bar{p}_N, 0) = \sum_{\bar{k}_1} \dots \sum_{\bar{k}_N} e_{\bar{k}_1} \dots e_{\bar{k}_N}(\bar{p}_1, \dots, \bar{p}_N) e^{-i \sum_j \bar{k}_j \bar{x}_j} \quad (55)$$

donde los vectores número de ondas \bar{K} tienen el siguiente espectro

de valores propios según se deduce de las condiciones periódicas de contorno

$$\bar{K} = \Omega^{-1/3} \bar{n}$$

donde \bar{n} es un vector cuyas componentes son números enteros.

Para algunas aplicaciones, principalmente cuando vamos a hacer infinito el volumen Ω en que se halla el sistema y el número N de partículas que contiene mientras que la concentración $\frac{N}{\Omega} = C$ permanece constante, es conveniente exhibir explícitamente la dependencia de las distintas cantidades en el volumen y en el número de partículas. En el caso en que $\Omega \rightarrow \infty$ el espectro de K es continuo. Las sumaciones se convierten en integrales con el siguiente sentido

$$\frac{1}{\Omega} \sum_k \rightarrow \int d^3K \quad (56)$$

Es fácil encontrar el significado físico de los diferentes términos del desarrollo de Fourier presentado arriba para la función de transformación. De hecho las propiedades físicas que no dependen de la posición no dependen tampoco de ningún vector número de ondas; las propiedades locales, que dependen únicamente de la posición del sistema, se expresan por medio de funciones que dependen de un sólo número de ondas; las correlaciones binarias, ternarias... contienen los coeficientes de Fourier que contienen como máximo 2, 3, ... números de ondas no nulas. (*)

(*) Esta investigación ha sido realizada con el apoyo financiero de la División de Investigación y Desarrollo de las Fuerzas Aéreas de Estados Unidos, y de la Junta de Energía Nuclear (Madrid).

BIBLIOGRAFIA

- 1 L. M. GARRIDO. *Proc. Phys. Soc. Inglaterra*. 76 (33) 1960.
- 2 L. M. GARRIDO. *Jour. Math. Analysis and Applications*. USA. 1961.
- 3 L. M. GARRIDO, F. GASCÓN, F. SANCHO. *Anales de la Real Sociedad*. De próxima aparición.
- 4 L. M. GARRIDO. *Prog. Theo. Physics*. Japón. Vol. 26, pg. 577, 1961.
- 5 L. M. GARRIDO, F. GASCÓN. *Nuclear Fusión*. Austria. De próxima aparición.
- 6 P. H. ROBERTS. *Jour Math. Analysis and Applications*. USA. 1. (195) 1960.
- 7 I. PRIGOGINE. *Physica*. Holanda. 25 (281) 1959.

(1) Los números entre corchetes corresponden a la nota bibliográfica.