APÉNDICES

Diego Medrano Jiménez
Supervisado por J. Clemente-Gallardo
Grado Física

APÉNDICE A: Descripción simpléctica de la Mecánica Clásica Hamiltoniana.[1]

Sea M_C el espacio de configuración del sistema. Se trata de una variedad simpléctica[2] que recibe el nombre de espacio de fases del sistema. En él, cada uno de los estados que lo forman, viene determinado por una posición $\vec{q}$ y su correspondiente momento $\vec{p}$, de forma que se puede considerar en los casos más simples $M_C \sim \mathbb{R}^{2n}$ (con n el número de grados de libertad).

Con respecto al espacio de "observables", son las funciones $f \in C^\infty(M_C)$ definidas sobre M_C

$$f : M_C \to \mathbb{R}$$

las que reflejan el proceso de medida, asignando a cada estado un determinado valor.

En este espacio de observables, se puede introducir una operación interna, conocida como corchete de Poisson $\{\cdot,\cdot\}$. Se trata de una operación bilineal

$$\{\cdot,\cdot\} : C^\infty(M_C) \times C^\infty(M_C) \to C^\infty(M_C)$$

que cumple las siguientes propiedades:

- Es antisimétrica.

$$\{f,g\} = -\{g,f\} \qquad \forall f,g \in C^\infty(M_C)$$

- Satisface la identidad de Jacobi.

$$\{f,\{g,h\}\} + \{h,\{f,g\}\} + \{g,\{h,f\}\} = 0 \qquad \forall f,g,h \in C^\infty(M_C)$$

- Satisface la regla de Leibniz.

$$\{f,gh\} = \{f,g\}h + g\{f,h\} \qquad \forall f,g,h \in C^\infty(M_C)$$

Es precisamente esta operación la que permite definir el espacio de observables $(C^\infty(M_C),\{\cdot,\cdot\})$ como un *álgebra de Poisson*. Si únicamente cumpliera las dos primeras propiedades sería un álgebra de Lie, lo que significa que un corchete de Poisson es un corchete de Lie que además satisface la regla de Leibniz.

Si las posiciones y momentos (q^i, p_i) son coordenadas de Darboux, comúnmente llamadas coordenadas canónicas en mecánica hamiltoniana, el corchete toma la forma:

$$\{f,g\} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q^i} - \frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q^i}$$

[1]Para un desarrollo más completo de esta descripción véase la referencia [3].
[2]Ver apéndice B: B.20.

Dado entonces este corchete de Poisson $\{\cdot,\cdot\}$ y una función $f \in C^\infty(M_C)$, podemos definir el concepto de *campo vectorial hamiltoniano* de la función f como aquel campo vectorial X_f tal que

$$X_f(g) = \{f, g\} \qquad \forall g \in C^\infty(M_C)$$

que en nuestras coordenadas canónicas tomará la forma:

$$X_f = \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial f}{\partial q^i}\frac{\partial}{\partial p_i}$$

Es así como en mecánica clásica hamiltoniana, se llama **sistema dinámico hamiltoniano** a una terna $(M_C, \{\cdot,\cdot\}, H)$, donde $\{\cdot,\cdot\}$ define una estructura de Poisson sobre M_C y donde H es una función $H \in C^\infty(M_C)$ que describe la dinámica del sistema a través de las curvas integrales de su campo vectorial hamiltoniano X_H.

$$X_H = \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i}\frac{\partial}{\partial p_i}$$

Esta función H recibe el nombre de *hamiltoniano* del sistema.

De manera análoga, también puede describirse la dinámica del sistema sobre el espacio de observables a través de la ecuación

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} \qquad \forall f \in C^\infty(M_C)$$

De esta forma, considerando las funciones "posición" $q^i(t)$ y "momento" $p_i(t)$ de una partícula se tiene que

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad\qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}$$

que resultan ser las ya conocidas como ecuaciones de Hamilton.

APÉNDICE B: Glosario de geometría diferencial.[3]

Primeramente, daremos algunas referencias sobre los objetos base de la geometría diferencial: las *variedades diferenciales:*

B.1. Definición: *Sea M un espacio topológico. Llamaremos carta n-dimensional en M, a un par $(\mathcal{U}, \varphi)$ tal que*

- *$\mathcal{U} \subset M$ es un abierto en M.*
- *φ es una aplicación $\varphi : \mathcal{U} \to \varphi(\mathcal{U}) \subset \mathbb{R}^n$ abierta y φ es un homeomorfismo de $\mathcal{U}$ en $\varphi(\mathcal{U})$.*

Si consideramos entonces dos cartas $(\mathcal{U}, \varphi)$ y $(\mathcal{U}', \varphi')$, diremos que son compatibles si son disjuntas $\mathcal{U} \cap \mathcal{U}' = \emptyset$, o bien la aplicación $\varphi' \circ \varphi^{-1} : \varphi(\mathcal{U} \cap \mathcal{U}') \to \varphi'(\mathcal{U} \cap \mathcal{U}')$ es un difeomorfismo de abiertos de $\mathbb{R}^n$.

De esta forma dar una estructura diferenciable sobre M consiste en darle un *atlas*, que es un conjunto de cartas, dos a dos compatibles, que cubre todo M.

B.2. Definición: *Llamaremos variedad diferenciable, a toda variedad topológica dotada de una estructura diferenciable.*

Los siguientes conceptos a destacar serán los de *campos vectoriales* y *formas diferenciables* de una variedad diferenciable:

B.3. Definición: *Sea M una variedad diferenciable y $p \in M$. Llamaremos vector tangente en p a toda aplicación $X_p : C^\infty(p) \to \mathbb{R}$ que verifique:*

- *X_p es lineal, es decir: $X_p(\lambda f + \mu g) = \lambda X_p(f) + \mu X_p(g) \quad \lambda, \mu \in \mathbb{R}$.*
- *$X_p(f \cdot g) = f(p)X_p(g) + g(p)X_p(f)$ (Regla de Leibniz).*

También existe la posibilidad de definir los vectores tangentes como clase de equivalencia de curvas. De esta forma:

B.4. Definición: *Diremos que dos curvas γ_1 y γ_2 en la variedad M que parten de p, son equivalentes en p si existe una carta $(\mathcal{U}, \varphi)$ en p tal que*

$$\frac{d(\varphi \circ \gamma_1)}{dt}\Big|_{t=0} = \frac{d(\varphi \circ \gamma_2)}{dt}\Big|_{t=0}$$

siendo $\gamma_1(0) = p = \gamma_2(0)$.

B.5. Definición: *Llamaremos vector tangente en $p \in M$ a una clase de equivalencia en p de dichas curvas.*

[3]Para estudiar más en profundidad los elementos de este glosario, acudir a la referencia [1] y a las notas del curso de *Introducción a la geometría diferencial* del profesor José F. Cariñena. de la Univ. Zaragoza.

B.6. Definición: *Llamaremos espacio vectorial tangente a M en el punto p al espacio vectorial de los vectores en el punto p. Será denotado por $T_p(M)$.*

B.7. Definición: *El espacio lineal $T_p^*(M)$ dual de $T_p(M)$ recibe el nombre de espacio vectorial cotangente en $p \in M$. Sus elementos se llamarán covectores en p o vectores covariantes en p.*

En general, dada una función $f \in C^\infty(p)$, se puede definir un covector en $p \in M$, que denotaremos $(df)_p$ por $(df)_p(X_p) = X_p f$.

Como conclusión entonces:

B.8. Definición: *Un campo vectorial X sobre una variedad diferenciable M es una función*

$$X : M \to T(M) = \bigcup_{p \in M} T_p(M)$$

que asocia a cada punto $p \in M$ un vector $X_p \in T_p(M)$, siendo $T(M)$ el conjunto de todos los pares (p, X_p) con $p \in M$ y $X_p \in T_p(M)$.

B.9. Definición: *Una 1-forma diferencial en una variedad diferenciable M es una función*

$$\omega : M \to T^*(M) = \bigcup_{p \in M} T_p^*(M)$$

que asocia a cada punto $p \in M$ un covector $\omega_p \in T_p^*(M)$, siendo $T^*(M)$ el dual de $T(M)$.

Pasemos entonces al concepto de *aplicación diferencial* y *aplicación codiferencial* entre dos variedades diferenciables.

B.10. Definición: *Sea $F : M \to N$ una aplicación diferenciable de M en N. Para cada punto $p \in M$, la aplicación $F_{*p} : T_p(M) \to T_{F(p)}(N)$ definida mediante $F_{*p}(X_p)f = X_p(f \circ F), \forall f \in C^\infty(F(p))$, recibe el nombre de diferencial de F en $p \in M$.*

Como interpretación geométrica de esta aplicación, podríamos decir que F_{*p} es una aplicación lineal de $T_p(M)$ en $T_{F(p)}(M)$ tal que la imagen de un vector v tangente en $p \in M$ a la curva $\gamma : (-\epsilon, \epsilon) \to M$ con $\gamma(0) = p$, es el vector tangente a la curva $F \circ \gamma$ en el punto $F(p) \in N$.

B.11. Definición: *De la misma forma, llamaremos codiferencial de F en $p \in M$ a la aplicación lineal $F_p^* := (F_{*p})^* : T_{F(p)}^*(N) \to T_p^*(M)$ definida por $F_p^*(\omega_{F(p)})X_p = \omega_{F(p)}\left[F_{*p}(X_p)\right]$.*

Por supuesto, estos conceptos son generalizables al caso de campos tensoriales de tipo (r, s) y no sólo a los de tipo $(1, 0)$ (campos vectoriales) ó $(0, 1)$ (1-formas).

Visto entonces el significado de lo que es un campo vectorial y que un vector puede interpretarse como la clase de equivalencia de las curvas con el mismo "vector velocidad", podemos definir:

B.12. Definición: *Si X es un campo vectorial (diferenciable) sobre una variedad M, diremos que una curva diferenciable $\gamma : I \to M$, donde $I = (a, b)$, es una curva integral del campo X si*

$$\left.\frac{d\gamma}{dt}\right|_{t=t_0} = X_{\gamma(t_0)} \qquad \forall t_0 \in (a, b)$$

De esta forma puede demostrarse que la imagen a través de la aplicación diferencial F_{*p} de una curva integral de X partiendo de $p \in M$, es una curva integral de $F_{*p}(X)$ partiendo de $F(p) \in N$.

B.13. Definición: *Dado el campo vectorial X, llamaremos flujo de X y denotaremos por Φ_X a la aplicación $\Phi_X : \mathbb{R} \times M \to M$, definida por $\Phi_X(t, p) = \gamma_p(t)$; siendo $\gamma_p : I(p) \to M$ la curva integral maximal del campo X que parte de p.* A veces, a esta curva integral se le denota también como $\Phi_t(p)$.

Puesto que el vector tangente X_p a una curva integral $\Phi_t(p)$ en p es tal que $X_p = \left.\frac{d}{dt}\Phi_t(p)\right|_{t=0}$, vemos que

$$(Xf)(p) = X_p f = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t} \left[f(\Phi_t(p)) - f(p)\right] = \frac{d}{dt} \left[f(\Phi_t(p))\right]$$

De forma análoga, con el concepto de codiferencial, esta expresión puede ser reescrita como:

$$(Xf)(p) = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t} \left[(\Phi_t^* f)(p) - f(p)\right]$$

Y así:

B.14. Definición: *Para cada campo vectorial X y cada campo r-covariante ω definiremos la derivada de Lie de ω según el campo vectorial X como el campo r-covariante*:

$$(\mathcal{L}_X\omega)(p) = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t} \left[(\Phi_t^*\omega)(p) - \omega(p)\right]$$

donde se tiene que si ω es un campo r-covariante,

$$\left[(\Phi_t^*\omega)(X_1, \ldots, \ldots X_r)\right](p) = \omega(\Phi_t(p))(\Phi_{t*p}(X_{1p}), \ldots, \Phi_{t*p}(X_{rp}))$$

Vemos que, intuitivamente, la derivada de Lie no hace referencia más que a la variación de los campos ω a lo largo de las curvas integrales de X.

Vayamos ahora con algunos de los conceptos topológicos aparecidos:

B.15. Definición: *Llamaremos álgebra a todo par $(\mathcal{A}, \phi)$ en donde $\mathcal{A}$ es un $\mathcal{A}$-módulo y ϕ una aplicación bilineal $\phi : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \to \mathcal{A}$.*

B.16. Definición: *Diremos que un álgebra es asociativa si* $\phi(a, \phi(b, c)) = \phi(\phi(a, b), c), \forall a, b, c \in \mathcal{A}$.

B.17. Definición: *Diremos que un álgebra* $(\mathcal{L}, [\cdot, \cdot])$ *es de Lie si* $\forall a, b, c \in \mathcal{A}$

- $[a, b] + [b, a] = 0$ *(antisimétrica).*
- $[[a, b], c] + [[b, c], a] + [[c, a], b] = 0$ *(identidad de Jacobi).*

B.18. Definición: *Diremos que un álgebra* $(\mathcal{A}, \circ)$ *es de Jordan si* $\forall a, b \in \mathcal{A}$

- $a \circ b = b \circ a$ *(conmutativa).*
- $(a \circ b) \circ (a \circ a) = a \circ (b \circ (a \circ a))$ *(identidad de Jordan).*

B.19. Definición: *Diremos que un álgebra* $(\mathcal{A}, \{\cdot, \cdot\})$ *es de Poisson si es un álgebra de Lie y además* $\forall a, b, c \in \mathcal{A}$ *satisface*

- $\{a, bc\} = \{a, b\}c + b\{a, c\}$ *(regla de Leibniz).*

Por último daremos algunos conceptos de geometría simpléctica.

B.20. Definición: *Sea M una variedad diferenciable. Llamaremos forma simpléctica en M a una 2-forma cerrada ($d\omega = 0$) no degenerada (de rango máximo) ω. El par (M, ω) recibe el nombre de variedad simpléctica. En particular, cuando ω sea exacta ($\omega = d\Theta$) diremos que (M, ω) es una variedad simpléctica exacta.*

B.21. Teorema: *Sea M una variedad de dimensión finita n y sea ω una 2-forma bilineal antisimétrica. La 2-forma es no degenerada si y sólo si n es par, es decir, $n = 2m$ con $m \in \mathbb{N}$, y además $\omega^m = \omega \wedge \overset{m \text{ veces}}{\cdots} \wedge \omega$ es un elemento de volumen.*

B.22. Teorema: *(Teorema de Darboux) Si ω es una forma simpléctica en una variedad diferenciable M, para cada punto $x \in M$ hay una carta local coordenada en torno a x en la cual las coordenadas de ω son constantes.*

B.23. Corolario: *Si (M, ω) es una variedad simpléctica de dimensión finita $2n$, entonces, alrededor de cada punto $x \in M$, hay una carta coordenada $(\mathcal{U}, \varphi)$, en donde la aplicación φ está dada por $\varphi(x) = (q^1, \ldots, q^n, p_1, \ldots, p_n)$, tal que ω se escribe como:*

$$\omega = \sum_{i=1}^{n} dq^i \wedge dp_i$$

A tales coordenadas (q^i, p_i) las denominaremos coordenadas canónicas.

Referencias

[1] M. Nakahara. *Geometry, topology and physics.* IOP Publishing Ltd, 2003.

[2] F. Scheck. *Mechanics: From Newton's Laws to Deterministic Chaos.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2010.

[3] R. Abraham and J.E. Marsden. *Foundations of Mechanics.* Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1978.

[4] A. Ashtekar and T.A. Schilling. Geometrical Formulation of Quantum Mechanics. In *On Einstein's Path: Essays in Honor of Engelbert Schucking.* Springer, pages 23-65, 1999.

[5] T.W.B. Kibble. Geometrization of Quantum Mechanics. *Communications in Mathematical Physics,* 65(2):189-201, 1979.

[6] D.C. Brody and L.P. Hughston. Geometric Quantum Mechanics. *Journal of Geometry and Physics.* 38(1):19-53,2001.

[7] J. Clemente-Gallardo. The Geometrical Formulation of Quantum Mechanics. *Rev. Real Academia de Ciencias.* 67:51-103, Zaragoza, 2012.

[8] J.F. Cariñena, J. Clemente-Gallardo and G. Marmo. Geometrization of Quantum Mechanics. *Theoretical and Mathematical Physics.* 152(1):894-903, 2007.

[9] J. Clemente-Gallardo and G. Marmo. The Ehrenfest picture and the geometry of Quantum Mechanics. *Il Nuovo Cimento.* Vol.36C(3):35-52, 2013.

[10] J.L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J.C. Cuchí, P. Echenique and F. Falceto. Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics. *Journal of Physics A: Math. Theor.* 44, 395004, 2011.

[11] F.A. Bornemann, P. Nettesheim and C. Schütte. Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics. *Journal of Chemical Physics.* 105(3), 1996.

[12] R. Balescu. *Statistical Dynamics: Matter Out of Equilibrium.* London: Imperial College Press, 1997.

[13] J.L. Alonso, J. Clemente-Gallardo, J.C. Cuchí, P. Echenique and F. Falceto. Ehrenfest dynamics is purity non-preserving: A necessary ingredient for decoherence. *Journal of Chemical Physics.* 137(5), 2012.

[14] V. May and O. Kuhn. *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems.* Wiley-VCH, 2011.