david.sanchez-molina@upc.es

§1. Mecánica Clásica Hamiltoniana: espacio fásico.

En mecánica clásica el estado de un sistema queda especificado si se dan sus coordenadas generalizadas $q = (q_1,\ldots, q_n)$ y los momentos generalizados $p = (p_1,\ldots, p_n)$. El conjunto de pares posibles o estados del sistema $(q_1,\ldots, q_n, p_1,\ldots, p_n)$ se llama espacio fásico Γ. Dicho espacio fásico puede dotarse de estructura de variedad diferenciable de dimensión $2n$ sin más que considerar que el conjunto de coordenadas $(q_1,\ldots, q_n, p_1,\ldots, p_n)$ son las coordenadas asociadas a una carta local (U, φ) de dicha variedad, es decir: φ: $U\ (\subset \Gamma) \longrightarrow \mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ donde $x\in U$ y $\varphi(x) = (q_1,\ldots, q_n, p_1,\ldots, p_n)$. Usualmente se usan las abreviaciones: $q = (q_1,\ldots, q_n)$ y $p = (p_1,\ldots, p_n)$[1].

Ejemplo 1. Un sistema de N partículas que pueden moverse a lo largo en todo el espacio tridimensional queda convenientemente representado por una espacio fásico $\Gamma = \mathbb{R}^{3N}\times\mathbb{R}^{3N}$. Cada punto de dicho espacio x dado por sus coordenadas $(q_1,\ldots, q_{3N}, p_1,\ldots, p_{3N})$ representa un estado del sistema de N partículas. A medida que las partículas se mueven e interaccionan entre sí dicho punto se mueve por todo el espacio fásico Γ.

Ejemplo 2. Un péndulo físico es una masa m unida mediante una barra rígida a un punto alrededor del que puede oscilar o realizar revoluciones completas. Como la masa sólo puede moverse sobre un círculo para describir su posición sólo es necesaria una coordenada angular $\theta \in S^1$. Si además tenemos en cuenta que dependiendo de su energía inicial puede tener cualquier velocidad v y momento $p = mv \in \mathbb{R}^1$ un espacio fásico adecuado para describir este sistema es un una superficie cilíndrica $\Gamma = S^1\times\mathbb{R}^1$.

En un sistema hamiltoniano el movimiento de una partícula o *evolución temporal* queda descrito por las ecuaciones de Hamilton y la función de Hamilton correspondiente. Una función de Hamilton no dependiente del tiempo es una aplicación: $\mathscr{H}: \Gamma\longrightarrow\mathbb{R}$ [cuya interpretación es la energía del sistema en un momento dado]. Si consideramos una carta local $U \subset \Gamma$, podemos definir $H(q, p)$ de modo que $\mathscr{H}(x) = (H \circ \varphi)(x)$ y expresar en coordenadas locales las ecuaciones de Hamilton en la conocida forma:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{1}$$

Estas ecuaciones junto con ciertas condiciones iniciales describen las trayectorias en el espacio fásico Γ. Si $(q(t), p(t)) = (q_1(t),\ldots, q_n(t), p_1(t),\ldots, p_n(t))$, es la solución del sistema anterior la trayectoria en el espacio fásico es $x(t) = \varphi^{-1}(q(t), p(t))$. En estas condiciones se define el flujo hamiltoniano $\{T^t\}$ el espacio fásico como aquel conjunto de aplicaciones T^t: $\Gamma\longrightarrow\Gamma$ tales que $T^s(x(t)) = x(t+s)$. El conjunto de dichas aplicaciones usualmente forma un grupo uniparamétrico y conmutativo de aplicaciones con la operación de composición: $T^t \circ T^s = T^{t+s}$. Usualmente $T^t(x)$ se abrevia como T^tx.

[1] El conjunto de todos los $q = (q_1,\ldots, q_n)$ forma lo que se llama espacio de configuración o espacio geométrico Q que puede dotarse de estructura de variedad diferenciable de dimensión n. Como en general todos los posibles de $p = (p_1,\ldots, p_n)\in\mathbb{R}^n$ usualmente Γ puede identificarse con una variedad diferenciable del tipo $Q\times\mathbb{R}^n$ que es isomorfa al fibrado cotangente de Q, es decir, $\Gamma = TQ$. En estas páginas, sin embargo, no entraremos en ese tipo de sutilezas porque no son necesarias para entender la construcción de los espacios de Hilbert a partir de la mecánica clásica, por lo que es mejor no entrar en profundidad en ellas.

§2. Espacios de Medida y sistemas dinámicos generales.

Para entender comprender el formalismo de los espacios de Hilbert en Mecánica Cuántica y como todo sistema hamiltoniano clásico da lugar a un *espacio de Hilbert*, necesitamos hablar de espacios de medida. En esencia un espacio de medida es una tripleta (M, $\mathscr{S}$, μ) donde M es un conjunto cualquiera, $\mathscr{S}\subset\mathscr{P}(M)$ es una σ-álgebra de subconjuntos de M y μ: $\mathscr{S}\longrightarrow\mathbb{R}$ es una función definida positiva. En estas páginas sólo trataremos el caso en que $M = \Gamma$, es decir, se considerará el espacio fásico de un sistema físico como un *espacio medible*. En cuanto a las medidas, las más interesantes son aquellas medidas tales que $\mu(M) < \infty$. Toda medida de ese tipo puede transformarse en una *medida de probabilidad* μ_1 sin más que definir para cada $A\in\mathscr{S}$, $\mu_1(A) = \mu(A)/\mu(M)$.

Definición 1. Un *endomorfismo* T de un espacio de medida (M, $\mathscr{S}$, μ) es una aplicación exhaustiva (suprayectiva) de M en sí mismo. Tal que para todo $A\in\mathscr{S}$ se tiene que $T^{-1}A\in\mathscr{S}$ y que: $\mu(A) = \mu(T^{-1}A)$, donde $T^{-1}A$ no es otra cosa que la anti-imagen de A. Si además se cumple que T tiene inversa, que $TA\in\mathscr{S}$ y que $\mu(A) = \mu(T^{-1}A) = \mu(TA)$ se dice que T es un automorfismo del espacio de medida.

Definición 2. Un *sistema dinámico* (M, $\mathscr{S}$, μ, $\{T^t\}$) es un espacio de medida (M, $\mathscr{S}$, μ) donde se ha definido la evolución temporal mediante un grupo uniparamétrico $\{T^t\}$ de endomorfismos de dicho espacio de medida.

Sistemas Dinámicos en Mecánica Clásica Halmiltoniana. Volviendo ahora a los sistemas de la mecánica clásica las medidas en que estamos interesados en medidas definidas por integración de la 2n-forma ω:

$$\begin{gathered}\hat{\omega} = \rho(p,q)dp_1 \wedge \ldots \wedge dp_n \wedge dq_1 \wedge \ldots \wedge dq_n \qquad \omega = \varphi_*^{-1}(\hat{\omega}) \\ \mu_\rho(A) = \int_A \rho(\varphi(x))\,\omega \equiv \int_A \rho(\varphi(x))\,dp_1 \ldots dp_n dq_1 \ldots dq_n\end{gathered} \qquad [2]$$

En mecánica clásica son particularmente interesantes las medidas invariantes μ_ρ bajo las transformaciones T^t: $\Gamma\longrightarrow\Gamma$, es decir, aquellas medidas para las cuales el grupo de aplicaciones $\{T^t\}$ son endomorfismos del espacio (Γ, $\mathscr{S}$, μ_ρ). Por el teorema de Liouville puede probarse que dichas medidas invariantes cumplen la siguiente condición:

$$[\rho, H]_{cl} \equiv \sum_{k=1}^{n}\left[\frac{\partial\rho}{\partial q_k}\frac{\partial H}{dp_k} - \frac{\partial\rho}{\partial p_k}\frac{\partial H}{dq_k}\right] = 0 \qquad [3]$$

Si además ρ es tal que $\mu_\rho(\Gamma) = 1$ es sencillo interpretar cada medida μ_ρ como una distribución de probabilidad estacionaria con densidad de probabilidad en el espacio fásico ρ_Γ: $\Gamma\longrightarrow\mathbb{R}$ con $\rho = \rho_\Gamma \circ \varphi$ [2].

[2] En física estadística una medida μ_ρ típicamente usada es la que se obtiene tomando $\rho = \exp(-H(p,q)/kT)$ con la que se obtiene por ejemplo la función de partición $Z(T,V)$ para una sola partícula en la colectividad canónica. [Aquí T es la temperatura y V el volumen ocupado por las partículas del sistema].

§3. Operadores Unitarios e Isométricos adjuntos a un sistema dinámico

Tomemos una transformación medible[3] T de un espacio de medida $(M, \mathscr{S}, \mu)$ y consideremos el espacio vectorial de dimensión infinita $V_\mathbb{R}$ de todas las funciones reales sobre M, es decir, $V_\mathbb{R} = \{ f \mid f\colon M \longrightarrow \mathbb{R}\}$, sobre ese espacio se puede definir un operador lineal $U_T\colon V_\mathbb{R} \longrightarrow V_\mathbb{R}$ definido por $(U_T f)(x) = f(Tx)$ que llamaremos *operador adjunto* de la transformación medible T.

Usualmente se toma una situación algo más general considerando el espacio vectorial $V_\mathbb{C}$ de las funciones con valores en $\mathbb{C}$. Y en lugar de una simple aplicación T se trabaja con un grupo uniparamétrico de de transformaciones medibles $\{T^t\}$ del espacio de medida $(M, \mathscr{S}, \mu)$ y se define el grupo adjunto de operadores $\{U^t\}$ asociado al grupo de aplicaciones medibles $\{T^t\}$. Todos los operadores considerados tienen funciones propias f_U asociadas al valor propio 1, en particular toda f_U de la forma f_U = cte. es una función propia del operador U^t.

El siguiente theorema conecta las propiedades medibles definidas sobre el sistema dinámico $(M, \mathscr{S}, \mu, \{T^t\})$ con las del espacio vectorial de dimensión infinita $V_\mathbb{C}$.

Theorema 1. *Si* $\{T^t\}$ *es un grupo uniparamétrico de automorfismos del espacio de medida* $(M, \mathscr{S}, \mu)$ *entonces:*
(1) *el grupo adjunto de operadores* $\{U^t\}$ *definido sobre el espacio de Hilbert complejo* $L^2_\mu(M)$ *está formado por operadores unitarios*.
(2) *si* $\{T^t\}$ *es un flujo y el espacio de Hilbert* $L^2_\mu(M)$ *es separable, entonces el grupo adjunto de operadores* $\{U^t\}$ *es continuo*.

Podemos ver ahora la conexión con la mecánica cuántica si interpretamos cada función $f \in \mathcal{H} \equiv L^2_\mu(M)$ como la función de onda de una partícula. Como es sabido en Mecánica Cuántica se acepta que el conjunto de estados cuánticos tiene estructura de espacio de Hilbert[4]. Si f y g son vectores de $\mathcal{H} = L^2_\mu(M)$ puede verse que el producto escalar $\langle f, g\rangle$ y que la norma $\| f \| = \langle f, f \rangle^{1/2}$, que tienen interpretaciones probabilísticas, se conservan con el tiempo:

$$\left\langle U^t f, U^t g \right\rangle = \int_\Gamma f\left(T^t x\right) \overline{g}\left(T^t x\right) d\mu = \int_\Gamma f(x) \overline{g}(x) d\mu = \left\langle f, g \right\rangle \qquad [4]$$

Puede probarse también que la ecuación de Schrödinger es tal que conduce a una evolución temporal dada por operadores unitarios $U^t = \exp(iHt/\hbar)$.

Puede comprobarse también que con respecto la evolución temporal clásica del valor de una magnitud A (aquí por simplicidad consideraremos sólo magnitudes que no dependen explícitamente del tiempo), la evolución temporal cuántica coincide formalmente con su evolución temporal clásica. La identidad formal se da sin más que intercambiar el conmutador de Poisson $[\ ,\ ]_{cl}$ de la mecánica clásica por el conmutador $1/i\hbar \cdot [\ ,\ ]$ de operadores en el espacio de Hilbert cuántico $\mathcal{H}$. Veámoslo en detalle:

---

[3] Es decir, cualquier endomorfismo del espacio de medida considerado.

[4] Más concretamente el conjunto de estados se define como un conjunto de clases de equivalencia sobre el conjunto de vectores unitarios del espacio de Hilbert H del sistema. Dos vectores $f, g \in H$ son equivalentes si $f = e^{i\theta} \cdot g$ y $\|g\| = 1$ para algún θ, cada clase de equivalencia de las anteriores representa un estado del sistema [Si bien no todos los estados descritos así serán físicamente realizables].

1) Para el caso clásico tenemos:

$$\frac{dA}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}A\left(T^t x\right)=\frac{\partial \widetilde{A}}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}+\frac{\partial \widetilde{A}}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}=\frac{\partial \widetilde{A}}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial \widetilde{A}}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\equiv\left[\widetilde{A},H\right]_{cl}$$
$$\widetilde{A}(p,q)\equiv A(x) \qquad [5]$$

2) Mientras que el caso cuántico la evolución del valor esperado de una magnitud puede obtenerse fácilmente a partir de la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{d}{dt}\left\langle f,\hat{A}f\right\rangle=\left[\frac{d\langle f|}{dt}\right]|Af\rangle+\langle f|A\left[\frac{d|f\rangle}{dt}\right]=$$
$$-\tfrac{1}{i\hbar}\left\langle f\middle|\hat{H}\hat{A}\middle|f\right\rangle+\tfrac{1}{i\hbar}\left\langle f\middle|\hat{A}\hat{H}\middle|f\right\rangle\equiv\tfrac{1}{i\hbar}[A,H] \qquad [6]$$

Así pues la ecuación de Schrödinger postula evolución el estado cuántico $|f\rangle\equiv f\in\mathcal{H}$ tal que los valores esperados de una magnitud evolucionan según una ecuación análoga a la evolución del valor clásico de dicha magnitud (al menos formalmente).

§4. Comentarios finales

Aún en la teoría clásica la construcción de espacios de Hilbert de la forma $L^2_\mu(M)$ es interesante para estudiar diversas propiedades del sistema dinámico $(M, \mathscr{S}, \mu,\{T^t\})$ ya que muchas propiedades del mismo pueden reducirse a propiedades espectrales de los operadores unitarios $\{U^t\}$, por ejemplo la ergodicidad. Se dice que un sistema dinámico es ergódico si los únicos conjuntos $A\in\mathscr{S}$ tales que $\mu(A) = \mu(T^tA)$ cumplen que $\mu(A) = 0$ o $\mu(A) = 1$[5]. En esos sistemas la trayectoria de un punto genérico[6] x llena densamente el espacio fásico Γ, es decir, que $\forall y\in\Gamma$ y $\forall\varepsilon>0$ se cumple que $\exists t$: $\|y - T^tx\| < \varepsilon$.

Por último podemos usar este formalismo para probar el teorema de Wigner sobre el hecho de que las simetrías de un sistema dinámico cuántico se implementan como operadores unitarios sobre el espacio de Hilbert del sistema. Se dice que dos sistemas dinámicos hamiltonianos son isomorfos si existe una aplicación medible:

Ψ: $(\Gamma_1, \mathscr{S}_1, \mu_1,\{T_1^t\})\longrightarrow(\Gamma_2, \mathscr{S}_2, \mu_2,\{T_2^t\})$

con inversa también medible, tal que $T_2^t\Psi x = \Psi T_1^t x$. Es sencillo ver que dicho isomorfismo entre espacios fásicos induce una aplicación V_Ψ entre los respectivos espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1$ y $\mathcal{H}_2$, tal que $U_2^t = V_\Psi\cdot U_1^t\cdot V_\Psi^{-1}$ [*]. Una simetría del sistema dinámico de hecho no es otra cosa que un isomorfismo del espacio fásico en sí mismo, Ψ: $\Gamma_1\longrightarrow\Gamma_2$ tal que el hamiltoniano es invariante bajo dicha transformación: $\mathscr{H}(\Psi(x)) = \mathscr{H}(x)$. De la relación [*] y del hecho que U^t son operadores unitarios, se deduce que V_Ψ también es un operador unitario, y por tanto hemos visto que las simetrías de un sistema dinámico van asociadas a operadores unitarios sobre el espacio de Hilbert. Más aún si existe un grupo uniparamétrico de simetría (simetría continua) y el espacio de Hilbert es separable V_Ψ es de la forma $\exp(i\alpha L_\Psi)$ y puesto que $U^t = \exp(iHt/\hbar)$, la relación [*] implica que $[L_\Psi, H] = 0$ que por la ecuación [6] indica que L_Ψ es una magnitud conservada o constante del movimiento.

---

[5] Desde el punto de vista de U^t la ergodicidad se expresa de modo más simple: un sistema es ergódico si las únicas funciones asociadas al valor propio 1 son las funciones constantes.

[6] En realidad puede existir un conjunto de puntos de medida nula que viole la condición, por lo tanto deberíamos decir estrictamente que “para casi todo punto” x se cumple la condición.