Introducció d'urgència del principi de Hamilton i la formulació Lagrangiana de la mecànica clàssica[1].

Les ciències, en general, són bastides de forma inductiva, de manera que les distintes etapes del seu desenvolupament van sorgint com conseqüència de donar compliment a requeriments imposats pels resultats experimentals. En electromagnetisme, la interpretació dels resultats experimentals observats, com ara interaccions entre càrregues estàtiques, camps magnètics generats per corrents, donen lloc a les equacions de Coulomb, Ampère, etc. En termodinàmica, la impossibilitat de construir un mòbil perpetu de primera espècie (màquina tèrmica que proporciona treball sense consum d'energia) i de segona espècie (màquina tèrmica que proporciona la mateixa quantitat de treball que el calor que consumeix) donen lloc al primer (conservació d'energia) i segon (impossibilitat de conversió íntegra de calor en treball sense compensació) principis. De manera semblant es va desenvolupar la formulació Newtoniana de la mecànica clàssica.

Ara be, les ciències, una vegada construïdes solen travessar un segon procés d'ordenació on totes les equacions obtingudes de manera dispersa són rededuïdes ordenadament a partir d'uns pocs postulats o principis. Així, l'electromagnetisme pot ser reconstruït a partir de les equacions de Maxwell, la termodinàmica pot ser desenvolupada a partir del concepte d'estat d'equilibri més el principi maximal d'entropia. Igualment, la formulació més general de la llei del moviment en mecànica clàssica pot ser derivada a partir d'un principi extremal, anomenat principi de mínima acció. Encara que no imprescindibles, les reformulacions deductives tenen molts avantatges pràctics. En particular, en el cas de la mecànica clàssica, a més a més de simplificar enormement la resolució de problemes complexos amb presencia de lligadures, és la formulació que millor permet comparar-se amb la mecànica quàntica i establir-ne les seues similituds i diferències. Aquestes notes no pretenen sinó la més elemental introducció (d'urgència) a aquesta formulació i la recuperació a partir d'ella de la equació fonamental de mecànica Newtoniana (segona llei de Newton).

1 Principi de Hamilton o de mínima acció

L'estat de moviment d'un sistema de partícules queda determinat si en cada instant de temps t coneixem totes les seues coordenades $q_i(t)$ i velocitats $\dot{q}_i\ (t)$. A partir d'aquest coneixement podem determinar quines forces actuen sobre el sistema, les acceleracions, etc. El principi de Hamilton ens dona la manera d'obtenir-les. Segons aquest principi, tot sistema mecànic està caracteritzat per una Lagrangiana. La Lagrangiana és una funció de les coordenades, les velocitats i el temps, $L(q_1, q_2 ... q_s, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \ ... \ \dot{q}_s, t)$, de manera que el moviment del sistema dona compliment al principi extremal següent: Si fem la hipòtesi de que en $t = t_1$ i $t = t_2$ el sistema presenta unes determinades coordenades (que genèricament escrivim $q^{(1)}$ i $q^{(2)}$), doncs be, entre $q^{(1)}$ i $q^{(2)}$ les posicions que travessa el sistema són tal que la integral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \tag{1}$$

és mínima.

Cal fer notar la similitud formal entre aquest principi i el principi minimal de l'energia interna en termodinàmica (un sistema termodinàmic evoluciona, a entropia i volum constant, de manera que minimitza l'energia interna U fins assolir l'equilibri en el qual U és mínima) i els seus anàlegs per a H, F, G i S.

Per al cas de sistemes conservatius $L = T - V$, on T és l'energia cinètica i V la potencial, la qual és únicament funció de les coordenades $V(q)$. En sistemes no conservatius, com ara en presència de forces electromagnètiques, en que les forces poden ser derivades de potencials generalitzats U que depenen de coordenades i velocitats, $U(q, \dot{q})$, la Lagrangiana s'escriu de manera semblant $L = T - U$.

A partir d'aquest principi deduirem tot seguit la llei de moviment. Si anomenem q i $\dot{q}$ a les coordenades i velocitats que fan mínima la integral S, en qualsevol altra trajectòria pròxima que passe per $q^{(1)}$ i $q^{(2)}$ en els temps $t = t_1$ i $t = t_2$

[1]**Química Física Avançada 2005. Josep Planelles**

les coordenades, que denotarem q' i $\dot{q}'$, estaran relacionades segons: $q' = q + \delta q$, $\dot{q}' = \dot{q} + \delta \dot{q}$. La diferència δq, serà zero en els extrems $t = t_1$ i $t = t_2$. La condició extremal de S fa que la seua diferencial siga zero sobre la trajectòria que segueix el sistema, i.e., :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} [L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t)] dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) \delta q + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta \dot{q} \right] dt = 0 \tag{2}$$

considerem el segon membre de la darrera integral en eq. (2), que tot seguit integrarem per parts ($\int u\, dw = u\, w - \int w\, du$):

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta \dot{q}\, dt \tag{3}$$

Anomenem $dw = \delta(\dot{q}) dt = d(\delta q) = \delta(dq)$, aleshores $w = \delta q$. Anomenem $u = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)$. La integració per parts dóna lloc a:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta \dot{q}\, dt = \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right]_{t1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \delta q \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) dt = - \int_{t_1}^{t_2} \delta q \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) dt \tag{4}$$

perquè el terme entre claudàtors és zero, atès que δq és zero en els extrems $t = t_1$ i $t = t_2$.

Si incloem aquest resultat en l'eq. (2):

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q dt = 0 \tag{5}$$

i com δq és arbitrària, necessàriament,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) = 0 \tag{6}$$

Aquesta és l'anomenada equació de Lagrange. En sistemes conservatius $L = T - V$, $T = 1/2m(\dot{q})^2$ i $V = V(q)$, aleshores:

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} = F; \ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{d}{dt} \frac{d}{d\dot{q}} (1/2m(\dot{q})^2) = m \frac{d^2 q}{dt^2} = ma. \tag{7}$$

cosa que converteix l'equació (6) de Lagrange en la segona llei de Newton, $F = ma$.

Els avantatges de la formulació Lagrangiana està en la facilitat d'usar coordenades distintes a de les cartesianes (en general coordenades generalitzades). Per exemple, en cartesianes, el moment lineal en la direcció X és $p_x = mv_x$, però si treballem en polars, quin seria el moment "en la direcció" θ?. La resposta és immediata des de la formulació Lagrangiana: el moment és la derivada de L respecte de $\dot{q}$, com podem comprovar en el cas d'un sistema bidimensional on $q = x, y$ i $L = 1/2m[(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2] - V(x, y)$:

$$p_x = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = m \dot{x} = mv_x.$$

En polars $q = r, \theta$ i $L = 1/2m[(\dot{r})^2 + r^2(\dot{\theta})^2] - V(r, \theta)$, aleshores,

$$p_\theta = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = mr^2 \dot{\theta} = I\omega = L_z$$

Fixem-nos amb quina senzillesa la formulació Lagrangiana ens permet determinar el moment conjugat d'una coordenada qualsevol. Desprès, en passar a mecànica quàntica, succeirà que els operadors lligats a aquestes magnituds conjugades tindran una precisa relació de commutació: $[p_\alpha, \alpha] = i\hbar$.