

Cap.4. Elemente privind formalismul analitic al fizicii

4.A. Noțiuni de bază privind simetriile fizice

§4A.1. Deficiențele formalismului newtonian al mecanicii

Considerăm un sistem de N puncte materiale, de mase m_i și coordonate momentane x_i, y_i, z_i ($i=1,2,\dots,N$), care interacționează între ele (v.figura 4A.1). Fie $\bar{F}_i(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N)$ - forța care acționează asupra particulei i . Conform formalismului newtonian al mecanicii, evoluția în timp a sistemului celor N puncte materiale poate fi obținută prin integrarea sistemului format de cele $3N$ ecuații diferențiale “întrepătrunse”:

$$\begin{aligned} m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} &= F_{x_1}(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N), \\ m_1 \frac{d^2 y_1}{dt^2} &= F_{y_1}(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N), \\ m_1 \frac{d^2 z_1}{dt^2} &= F_{z_1}(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N), \\ m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} &= F_{x_2}(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N), \\ &\dots \\ m_N \frac{d^2 z_N}{dt^2} &= F_{z_N}(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N). \end{aligned} \tag{4A.1.1}$$

După cum se constată din volumul 1 al lucrării [1], chiar în cazul $N=2$, integrarea acestui sistem de ecuații diferențiale este dificilă, putând fi realizată doar după efectuarea câtorva artificii matematice relativ subtile (constând – în acest caz - în trecerea de la coordonatele carteziene la cele sferice). Începând cu $N=3$, sistemul de ecuații (4A.1.1) de mai sus nu mai admite – în cazul general – o soluție analitică, integrarea sa necesitând utilizarea unor metode de aproximații succesive (*problema celor 3 corpuri*). Chiar și în cazul sistemelor cu $N=3$ puncte materiale care admit soluții analitice ale sistemului de ecuații (4A.1.1), artificii matematice care conduc la soluțiile analitice corespunzătoare nu sunt evidențiate de formalismul newtonian al mecanicii. Este firească întrebarea: *care este motivul pentru care formalismul newtonian întâmpină dificultăți chiar în cazurile particulare ale existenței unor soluții analitice?* Este ușor de constatat că motivul constă în *neluarea în considerație de către formalismul newtonian a simetriei specifice fiecărei probleme fizice*. Spre exemplu, utilizarea coordonatelor carteziene pentru descrierea mișcărilor de pendulare, respectiv de rotație ale unui pendul matematic (v.figura 4A.2) este total neadecvată.

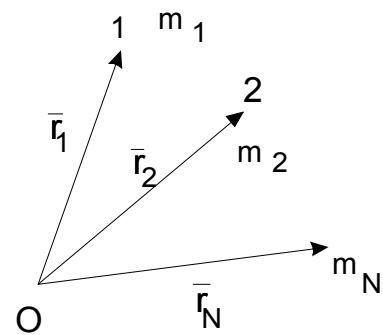


Fig 4A.1

Deoarece pentru disciplina Fizică predată studenților ingineri, cele mai importante sisteme fizice sunt cele cristaline, respectiv cele moleculare, următoarele paragrafe vor studia îndeosebi simetriile geometrice nepunctuale (specifice cristalelelor), respectiv cele punctuale (specifice moleculelor). Unele elemente suplimentare privind simetriile fizice au fost deja discutate în cadrul capitolului 2 (în legătură cu teoremele de conservare), vor interveni și în partea a doua (B) a acestui capitol, precum și în cadrul capitolelor următoare.

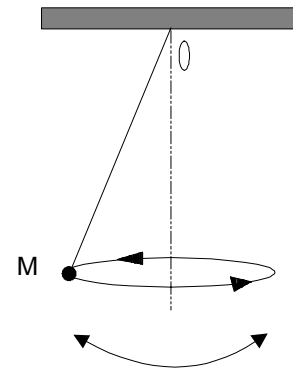


Fig 4A.2

§4A.2. Vectori de bază și celule elementare ale rețelelor cristaline

Deoarece dimensiunile corpurilor solide uzuale (de ordinul de mărime al 1 cm) sunt mult mai mari decât distanțele interatomice (de ordinul a 10^{-10} m), eșantioanele uzuale de solide pot fi considerate drept infinite pentru fenomenele locale (interatomice).

Cei mai mici vectori necoplanari \vec{a}, \vec{b} și \vec{c} ai unei rețele cristaline, care au proprietățile:

(i) efectuarea **operației de simetrie de translație** t_R , definită drept translația de la un vector arbitrar de poziție \vec{r} până la noul vector de poziție:

$$\vec{r}_N = \vec{r} + m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \quad (4A.2.1)$$

(m, n și $p \in \mathbf{Z}$, unde \mathbf{Z} este mulțimea numerelor întregi, valorile m, n și p nefiind mult mai mari decât 1), conduce la o nouă configurație a rețelei cristaline (presupusă drept infinită) identică față de cea inițială,

(ii) paralelepipedul (numit **celula elementară simetrică**) care are vectorii \vec{a}, \vec{b} și \vec{c} drept laturi (v. Figura 4A.3) posedă numărul maxim de elemente de simetrie ale respectivei rețele cristaline [1],[2], sunt numiți **vectori de bază** (sau **vectori de periodicitate**) ai rețelei cristaline considerate.

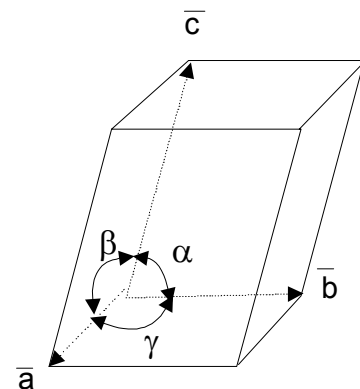


Fig 4A.3

O altă caracteristică importantă a celulei elementare de simetrie este volumul său:

$$V_o = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}).$$

Un sistem infinit de puncte materiale (atomi sau ioni), care pot fi obținute pornind de la un singur punct material (atom sau ion) prin intermediul operațiilor **discrete** de translație \vec{r}_N este numit **rețea cristalină simplă (Bravais)** (v. Figura 4A.4a, pentru cazul particular al unei rețele uni-dimensionale). Dacă obținerea prin translații discrete a unui sistem infinit periodic de puncte materiale (atomi sau ioni) este posibilă doar pornind de la o **bază** formată de N (≥ 2) atomi, avem o **rețea cristalină complexă** (v. Figura 4A.4b, corespunzând unei rețele complexe unidimensionale). Fizicianul francez Auguste Bravais (1811-1863) a arătat că – în funcție de caracterul simplu sau specific complex al rețelei cristaline - există 4 tipuri de celule (unitate) elementare simetrice tri-dimensionale:

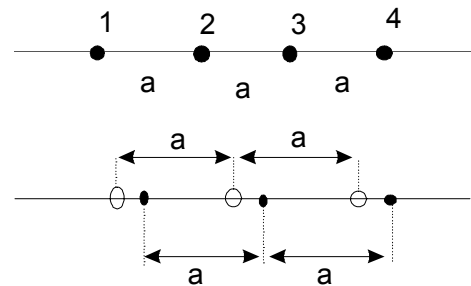


Fig 4A.4

celula elementară simetrică simplă (notată prin P, de la denumirea "retea primitivă", v. figura 4A.5a), celula cu baze centrate (notată prin B sau C, figura 4A.5b), celula elementară simetrică cu fețe centrate (simbol F, fig. 4A.5c) și cea cu volum centrat (simbol I, figura 4a.5d).

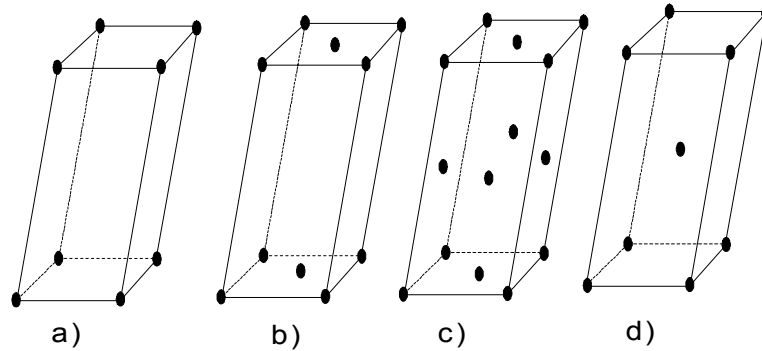


Fig4A.5

Deoarece tipurile specifice de rețele și celule elementare (unitate) de simetrie depind de simetria rețelei cristaline, următoarea secțiune va examina această problemă.

§4A.3. Principalele elemente și operații de simetrie corespunzând sistemelor fizice

O transformare geometrică pentru care configurația finală a sistemului fizic studiat este identică cu aceea inițială este numită **operație de simetrie** (simbol \hat{O}). În afara operațiilor de simetrie de translație (§4A.2), sistemele fizice admit unele operații de simetrie care păstrează nemodificată poziția cel puțin unui punct material al sistemului; aceste operații sunt numite **operații de simetrie punctuale**. Aceste operații corespund anumitor **elemente de simetrie punctuale**.

Principalele elemente și operații de simetrie punctuale sunt sintetizate în Tabelul 4A.1.

Vom sublinia că existența unei axe S_{2n} de rotație și oglindire de ordinul $2n$ nu implică în mod necesar existența axei C_{2n} corespunzătoare și nici a planului σ_h ; pentru a exemplifica acest lucru, Figura 4A.6 prezintă configurația de echilibru a inelului moleculei de ciclohexan (această moleculă posedă o axa S_6 , dar nu admite elementele de simetrie corespunzătoare C_6 și σ_h).

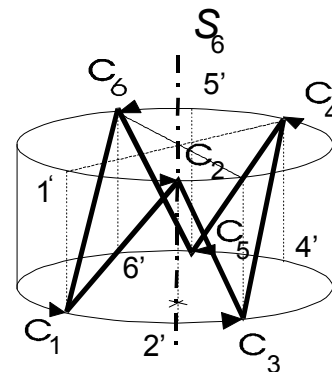


Fig 4A.6

Desigur, există de asemenea combinații ale operațiilor de simetrie punctuale și a celor de translație. Spre exemplu, efectuarea unei translații și a unei rotații este echivalentă cu o **operație de înșurubare**: $\hat{S}_{nR} = \hat{C}_n \hat{T}_R$,

unde $\hat{T}_R \equiv (\vec{r} \rightarrow \vec{r} + m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c})$.

§4A.4. Grupuri de simetrie

Deoarece o operație de simetrie conduce la o configurație a sistemului fizic studiat identică cu aceea inițială, efectuarea succesivă a două operații de simetrie conduce de asemenea la o configurație identică cu aceea inițială, deci **produsul a două operații de simetrie este egal cu o altă operație de simetrie**:

$$\hat{O}_2 \hat{O}_1 = \hat{O} \quad (4A.4.1)$$

Se poate constata de asemenea ușor că **operația de identitate** \hat{E} este o operație neutră, deoarece:

$$\hat{E} \bar{r} = \bar{r} \quad (4A.4.2)$$

Operația inversă de simetrie \hat{O}^{-1} (față de cea directă \hat{O}) fiind definită drept cea care satisface condițiile:

$$\hat{O} \hat{O}^{-1} = \hat{O}^{-1} \hat{O} = \hat{E} \quad (4A.4.3)$$

se constată că există operații inverse de simetrie pentru fiecare tip de operații de simetrie:

$$\hat{T}_{mnp}^{-1} = \hat{T}_{-m,-n,-p}, \quad \hat{C}_n^{-1} = \hat{C}_n^{n-1}, \quad \hat{\sigma}_{v,h,d}^{-1} = \hat{\sigma}_{v,h,d}, \quad \hat{S}_{2n}^{-1} = \hat{S}_{2n}^{2n-1} \quad \text{\textit{\textless s.a.m.d.}} \quad (4A.4.4)$$

și - în general:

$$(\hat{O}_2 \hat{O}_1)^{-1} = \hat{O}_1^{-1} \hat{O}_2^{-1} \quad (4A.4.5)$$

Reiese că **structura algebrică** a mulțimii operațiilor de simetrie care aparțin unui sistem fizic dat **corespunde unui grup** (simbol G).

Numărul h al elementelor grupului este numit **ordin al grupului**.

După cum pentru orice pereche de operații de simetrie $\hat{O}_1, \hat{O}_2 \in G$, avem:

$$\hat{O}_1 \hat{O}_2 = \hat{O}_2 \hat{O}_1 \quad (4A.4.6)$$

sau nu, respectivul grup de simetrie este numit **grup abelian**, respectiv **grup neabelian**.

Pentru fiecare grup de simetrie, tabelul care cuprinde produsele diferitelor perechi de operații de simetrie este numit **tabel (specific) de multiplicare a elementelor grupului**.

Se definește **conjugatul elementului O_i față de elementul O_j** cu ajutorul relației:

$$\hat{O}_k = \hat{O}_j^{-1} \hat{O}_i \hat{O}_j \quad (4A.4.7)$$

Notă: Folosirea parametrilor: (i) *caracterul operației punctuale* s ($=1$ pentru operațiile de rotație sau un număr par de operații de oglindire și $s = -1$ pentru un număr impar de operații de oglindire) și: (ii) *parametrului vectorial* \bar{q} , definit drept:

$$\bar{q} = \sin\left[\frac{\varphi}{2} + (s-1)\frac{\pi}{4}\right] \cdot \bar{1}_a, \quad (4A.4.8)$$

unde φ este unghiul de rotație, iar $\bar{1}_a$ este vectorul unitar (versorul) axei de rotație (respectiv al normalei pe planul de oglindire), permite deducerea simplă a produselor, inverselor și conjugatelor oricăror operații de simetrie punctuale [3].

Astfel, efectuarea operației punctuale $\hat{O}_2(\bar{q}_2, s_2)$ după operația punctuală $\hat{O}_1(\bar{q}_1, s_1)$ conduce la operația punctuală echivalentă:

$$\hat{O}(\bar{q}, s) = \hat{O}_2(\bar{q}_2, s_2) \cdot \hat{O}_1(\bar{q}_1, s_1) = \hat{O}[s_{12}(q_2 \bar{q}_1 + q_1 \bar{q}_2 - \bar{q}_1 \times \bar{q}_2), s_1 s_2] \quad (4A.4.9)$$

unde "norma" q' a dualului \bar{q}' al vectorului \bar{q} și parametrul s_{12} sunt definite drept:

$$q' = \left| \sqrt{1 - q^2} \right| \quad \text{si:} \quad s_{12} = \text{sign}(q_1 q_2 - \bar{q}_1 \cdot \bar{q}_2) \quad (4A.4.10)$$

În mod similar, *inversa oricărei operații de simetrie punctuale* este dată de expresia:

$$\hat{O}^{-1}(\bar{q}, s) = \hat{O}(-\bar{q}, s) \quad (4A.4.11)$$

În fine, *conjugatul operației de simetrie* \hat{O}_i față de o altă operație de simetrie punctuală \hat{O}_j este [3b]:

$$\hat{O}_j^{-1} \hat{O}_i \hat{O}_j = \hat{O}[2(\bar{q}_i \cdot \bar{q}_j)\bar{q}_j + 2q_j(\bar{q}_i \times \bar{q}_j) + (q_j^2 - q_i^2)\bar{q}_i, s_i] \quad (4A.4.12)$$

Problema 4A.4.1: Dacă \hat{O}_k și \hat{O}_n sunt două conjugate diferite ale \hat{O}_i , demonstrați că \hat{O}_k și \hat{O}_n sunt de asemenea conjugate între ele.

Rezolvare: Deoarece: $\hat{O}_n = \hat{O}_m^{-1} \hat{O}_i \hat{O}_m$ (unde $\hat{O}_i, \hat{O}_j, \hat{O}_k, \hat{O}_m, \hat{O}_n \in G$), se constată că:

$$\hat{O}_i = \hat{O}_j \hat{O}_k \hat{O}_j^{-1} = \hat{O}_m \hat{O}_n \hat{O}_m^{-1}, \text{ deci: } \hat{O}_n = (\hat{O}_m^{-1} \hat{O}_j) \hat{O}_k (\hat{O}_m^{-1} \hat{O}_j)^{-1}.$$

Deoarece – în conformitate cu definiția grupurilor - produsul $\hat{O}_m^{-1} \hat{O}_j$ este de asemenea o operație de simetrie a grupului G , reiese că operațiile de simetrie \hat{O}_k și \hat{O}_n sunt de asemenea conjugate între ele.

Mulțimea elementelor $\hat{O}_k, \hat{O}_n, \dots$ conjugate ale \hat{O}_i față de diferitele elemente \hat{O}_j

($j=1,2,\dots,h$) formează **clasa de simetrie asociată elementului** \hat{O}_i . Desigur, pentru grupuri abeliene, fiecare element formează el însuși o clasă (deci, numărul claselor unui grup abelian este egal cu ordinul grupului). Pentru a studia în detaliu structura claselor de simetrie ale diferitelor grupuri punctuale, v. spre exemplu [3].

Problema 4A.4.2: Deduceți clasele de simetrie ale grupului punctual C_{2v} corespunzând operațiilor de simetrie permise de configurația de echilibru (triunghi isoscel) a moleculei de apă.

Rezolvare: Configurația de echilibru a moleculei de apă admite (v. Figura 4A.7) patru operații de simetrie:

identitatea E , rotația cu $\frac{2\pi}{2}$ radiani în jurul axei de simetrie

C_2 a moleculei, planele de oglindire "verticale" σ_{v1} (planul moleculei) și σ_{v2} (planul bisector).

Rezultatele privind produsele diferitelor operații ale acestui grup de simetrie sunt sintetizate în Tabelul 4A.2, care reprezintă astfel **tabelul de multiplicare** al acestui grup. Din acest tabel, se constată că grupul de simetrie C_{2v} este abelian.

Reiese de asemenea că grupul punctual C_{2v} are clase de simetrie: E, C_2, σ_{v1} și σ_{v2} .

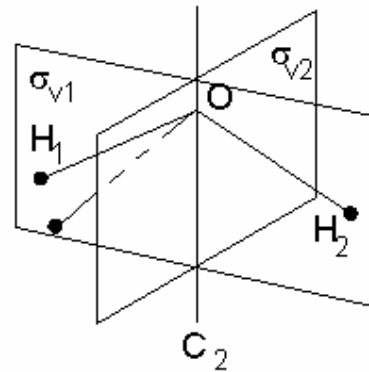


Fig 4A.7

Tabelul 4A.2.

\hat{O}_1	\hat{O}_2	E	C_2	σ_{v1}	σ_{v2}
E	E	E	C_2	σ_{v1}	σ_{v2}
C_2	C_2	C_2	E	σ_{v2}	σ_{v1}
σ_{v1}	σ_{v1}	σ_{v1}	σ_{v2}	E	C_2
σ_{v2}	σ_{v2}	σ_{v2}	σ_{v1}	C_2	E

Produsele $\hat{O}_2 \hat{O}_1$ operațiilor grupului de simetrie C_{2v}

§4A.5. Grupuri punctuale particulare și sistemele cristaline care le sunt asociate

Este posibil să se constate ușor că anumite grupuri punctuale sunt asociate sistemelor cristaline posibile.

a) Grupuri punctuale și sisteme cristaline de joasă simetrie

După cum un grup de simetrie nu include axe de rotație de ordin $n \geq 3$, include o singură asemenea axa, sau include mai multe axe C_n ($n \geq 3$), respectivul grup este numit de **joasă, medie** sau – respectiv - de **întă simetrie**.

(i) Grupul punctual S_2 ; sistemul cristalin triclinic

În general, grupul S_{2n} include operațiile de simetrie $\hat{S}_{2n}, \hat{S}_{2n}^2, \dots, \hat{S}_{2n}^{2n-1}$ și $\hat{S}_{2n}^{2n} = \hat{E}$. Grupul punctual S_2 include doar identitatea \hat{E} și inversia $\hat{S}_2 \equiv \hat{I}$. În timp ce Figura 4A.8a prezintă o moleculă ($C_2Cl_2Br_2H_2$) a cărei configurație de echilibru aparține acestui grup de simetrie, figura 4A.8b prezintă singura celulă elementară de simetrie (cea simplă, P) care corespunde **sistemului cristalin triclinic** (cu 3 înclinații diferite: $\alpha \neq \beta \neq \gamma$, $a \neq b \neq c$), iar figura 4A.8c explică de ce celula elementară cu baze centrate C ($\equiv B$) nu poate exista pentru acest sistem (această celulă s-ar reduce la alte celule elementare triclinice simple, cu lungimi mai mici ale laturilor decât acelea corespunzând adevăratei celule elementare).

(ii) Grupul punctual C_{2h} ; sistemul cristalin monoclinic

În general, grupul de simetrie C_{nh} include operațiile corespunzând produsului cartezian al grupurilor C_n și σ_h : $\{\hat{C}_n, \hat{C}_n^2, \dots, \hat{C}_n^n \equiv \hat{E}, \hat{C}_n \hat{\sigma}_h, \dots, \hat{C}_n^n \hat{\sigma}_h \equiv \hat{\sigma}_h\}$. În particular, grupul punctual C_{2h} include doar operațiile $\hat{C}_2, \hat{\sigma}_h$ și - desigur - inversia \hat{I} și identitatea \hat{E} . Figura 4A.9a prezintă o moleculă ($C_6Cl_2Br_2H_2$) a cărei configurație de echilibru aparține acestui grup de simetrie (C_{2h}), în timp ce figurile 4A.9b și 4A.9c prezintă cele 2 celule elementare de simetrie (celula elementară simplă P și aceea cu baze centrate (o pereche de baze paralele cu axa C_2 [4]), notată prin C sau B) ale **sistemului cristalin monoclinic** (cu o singură înclinație: $\gamma \neq 90^\circ = \alpha = \beta, a \neq b \neq c$).

(iii) Grupul punctual D_{2h} ($\equiv V_h$); sistemul cristalin ortorombic

Pornind de la grupul D_n , construit în baza unei axe C_n și a n axe de rotație U_2 (perpendiculare pe axa C_n), se obține – printr-un produs cartezian cu grupul σ_h , corespunzând identității și operației de oglindire într-un plan "orizontal" (perpendicular pe axa C_n) - grupul punctual $D_{nh} = D_n \times \sigma_h$.

În particular, grupul punctual D_{2h} include operațiile de simetrie corespunzând (asociate) celor 3 axe de rotație (reciproc perpendiculare) C_2 și de asemenea - desigur - inversia \hat{I} și identitatea \hat{E} . Figura 4A.10a prezintă configurația de echilibru a moleculei C_2H_4 , care aparține grupului punctual D_{2h} , în timp ce Figura 4A.10b arată cele 4 celule elementare de simetrie: celula elementară primitivă P, cea cu baze centrate C ($\equiv B$), celula elementară cu volum centrat I și - în sfârșit – celula elementară cu fețe centrate F, ale **sistemului cristalin ortorombic** ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a \neq b \neq c$).

b) Grupuri punctuale și sisteme cristaline de simetrie medie

Deoarece suma de unghiuri ale unui poligon cu n laturi este egală cu $(n-2)\pi$ radiani, unghiurile din vârfurile unui poligon regulat cu n laturi sunt egale cu $\frac{(n-2)\pi}{n}$ radiani. Condiția de "umplere" a planului în jurul centrului de inversie este echivalentă cu cerința: $\frac{2\pi}{(n-2)\pi/n} = \frac{2n}{n-2} \in N$, care este îndeplinită doar de axele C_n de ordinele $n=3; 4$ și 6 (la care se adaugă desigur – pentru grupurile de joasă simetrie – și ordinele $n=1$, respectiv $n=2$).

(i) Grupul punctual D_{6h} ; sistemul cristalin hexagonal

Operațiile (și clasele) de simetrie ale grupului punctual D_{6h} corespund axei de rotație C_6 , celor 6 axe U_2 (perpendiculare pe axa C_6), planului de simetrie "orizontal" (perpendicular pe axa de rotație C_6) σ_h , axelor C_2, C_3 și S_6 (situat toate în lungul direcției axei de rotație C_6), precum și operațiilor de inversie \hat{I} , respectiv identitate \hat{E} . Figura 4A.11a prezintă configurația de echilibru a moleculei de benzen (C_6H_6), care aparține grupului D_{6h} , în timp ce figura 4A.11b arată singură celula elementară de simetrie (cea primitivă, P) corespunzând **sistemului cristalin hexagonal** ($\gamma = 120^\circ, \alpha = \beta = 90^\circ, a = b \neq c$), care admite operațiile de simetrie ale grupului punctual D_{6h} .

(ii) Grupul punctual D_{4h} ; sistemul cristalin tetragonal

Operațiile (și clasele) de simetrie ale grupului punctual D_{4h} corespund: axei de rotație C_4 , celor 4 axe U_2 (perpendiculare pe axa C_4), celor 4 plane "verticale" de simetrie σ_v (paralele cu axa de rotație C_4), planului "orizontal" de simetrie σ_h (perpendicular pe axa C_4), axelor C_2 și S_4 (care au direcția axei de rotație C_4), precum și operațiilor de inversie \hat{I} și identitate \hat{E} . Structura mulțimii formate de aceste elemente de simetrie este similară celei corespunzând grupului D_{6h} , un exemplu de moleculă a cărei configurație de echilibru aparține grupului D_{4h} fiind cea a ciclobutanului (C_4H_8). Figura 4A.12a prezintă cele 2 celule elementare de simetrie: cea primitivă P și celula cu volum centrat I, corespunzând **sistemului cristalin**

tetragonal (4 unghiuri identice în jurul centrului de inversie, în planul perpendicular pe axa de înaltă simetrie: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ și: $a = b \neq c$), care include operațiile de simetrie ale grupului punctual D_{4h} .

(iii) **Grupul punctual D_{3d} ; sistemul cristalin trigonal (romboedric)**

Elementele de simetrie care generează grupul D_{nd} ($\equiv S_{2n,v}$) sunt: axa de rotație C_n , cele n axe U_2 (perpendiculare pe axa C_n) și cele n plane "diagonale" de simetrie (bisectoare față de perechile de axe U_2 vecine). În particular, operațiile (și clasele) de simetrie ale grupului punctual D_{3d} ($\equiv S_{6v}$) corespund: axei C_3 , celor 3 axe U_2 , celor 3 plane "diagonale" de simetrie σ_d (fiecare dintre ele fiind perpendicular pe câte o axă U_2), axei S_6 (având direcția axei C_3) și – în sfârșit – centrului de inversie i (operația de identitate \hat{E} fiind, desigur, de asemenea inclusă).

Figura 4A.13a prezintă configurația de echilibru a moleculei de etan (C_2H_6), care aparține grupului punctual D_{3d} ($\equiv S_{6v}$), în timp ce figura 4A.13b arată singura celulă elementară de simetrie (cea primitivă P), corespunzând **sistemului cristalin romboedric (trigonal:** $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$; $a=b \neq c$), care admite operațiile de simetrie ale grupului punctual D_{3d} . Vom menționa că o asemenea celulă elementară corespunde cristalului de carbonat de calciu (**calcit**), care este folosit pentru fabricarea **prismelor nicol** (aceste prisme sunt folosite pentru a obține polarizarea luminii prin birefringență).

c) **Grupuri punctuale de înaltă simetrie; sistemul cristalin cubic**

Principalele grupuri punctuale de înaltă simetrie sunt: T_d (corespunzând tetraedrului și – în particular – configurației de echilibru a moleculei de metan (CH_4); v.figura 4A.14a) și O_h (corespunzând cubului; v.figura 4A.14b). Principalele elemente de simetrie ale grupului punctual T_d sunt: cele 4 axe C_3 , cele 3 axe C_2 (reciproc perpendiculare) și cele 3 plane "diagonale" de simetrie σ_d , în timp ce principalele elemente de simetrie ale grupului punctual O_h sunt: cele 3 axe C_4 , cele 4 axe C_3 , cele 6 axe C_2 și cele 3 plane "orizontale" de simetrie σ_h (perpendiculare pe axele C_4). Mulțimea operațiilor de simetrie ale grupului punctual O_h cuprinde cele 3 axe C_4 (reciproc perpendiculare), cele 4 axe C_3 , cele 4 axe de rotație+ogindire S_6 (având direcțiile axelor C_3), cele 3 axe S_4 (situat după direcțiile axelor C_4), cele 6 axe C_2 , cele 9 plane de simetrie (dintre care 3 plane σ_h și 6 σ_d), centrul de inversie i și include - desigur - și identitatea \hat{E} .

Analiza **sistemului cristalin cubic** ($a=b=c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) arată că – în acest caz – pot exista 3 celule elementare de simetrie: cea primitivă P , celula elementară cu fețe centrate F și celula elementară cu volum-centrat I (v. figura 4A.15). Menționăm că cele mai multe rețele cristaline ale metalelor aparțin sistemului cristalin cubic, având celule elementare de simetrie cu volum centrat I : Li, Na, K, Cr (α), Fe (forme cristalină α, β, δ), Rb, Zr, Nb, Mo, Cs, Ba, Ta, W, respectiv celule elementare de simetrie cu fețe-centrate F : Al, Cu (α), Fe (forma γ), Co, Ni, Cu, Sr, Tc, Pd, Ag, Pt, Au, Pb, Th și altele [5].

În sfârșit, analiza de mai sus arată că - în cazul rețelelor cristaline tridimensionale – există 7 sisteme cristaline diferite, cărora le corespund 14 tipuri diferite de celule elementare de simetrie (vezi Tabelul 4A.3, [3],[5] and [6]).

Tabelul 4A.3.

TIPUL SIMETRIEI	Grupul punctual tipic	SISTEMUL CRISTALIN	Tipurile celulelor elementare	Exemple Importante
JOASĂ	S_2	TRICLINIC ($a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$)	P	
JOASĂ	C_{2h}	MONOCLINIC ($\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma; a \neq b \neq c$)	P, C ($\equiv B$)	α, β – Se
JOASĂ	$D_{2h} (\equiv V_h)$	ORTOROMBIC ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a \neq b \neq c$)	P, C, F, I	Ge, S, α – Np P negru
MEDIE	D_{6h}	HEXAGONAL ($\gamma = 120^\circ; \alpha = \beta = 90^\circ; a = b \neq c$)	P	Cuarț (aprox.), Mg și unele metale
MEDIE	D_{4h}	TETRAGONAL ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b \neq c$)	P, I	In, Sb alb
MEDIE	D_{3d}	ROMBOEDRIC (TRIGONAL): $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ; a = b = c$	P	$CaCO_3$ (calcit), Hg, Bi, grafit
INALTĂ	O_h	CUBIC ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b = c$)	P, F, I	Majoritatea Metalelor (v.textul)

Clasificarea sistemelor cristaline corespunzând rețelelor cristaline tridimensionale

§4A.6. Elemente de teoria reprezentărilor matriciale ale grupurilor de simetrie

O aplicație Γ_i a grupului de simetrie G pe o mulțime M (cu structura algebrică omoloagă) de matrici pătrate de un anumit ordin se numește *reprezentare matricială a grupului G în M* dacă:

a) pentru orice $\hat{U}_j, \hat{U}_k \in G$ și o lege arbitrară T de compunere internă a elementelor grupului G :

$$\Gamma_i(\hat{U}_j T \hat{U}_k) = \Gamma_i(\hat{U}_j) T_\varsigma \Gamma_i(\hat{U}_k), \tag{4A.6.1}$$

unde T_ς este legea de compunere internă a elementelor mulțimii M , omoloagă cu legea T a grupului G ,

b) pentru orice $\hat{U}_j \in G$ și o lege arbitrară \perp de compunere externă a elementelor grupului G :

$$\Gamma_i(\alpha \perp \hat{U}_j) = \alpha \perp_\varsigma \Gamma_i(\hat{U}_j), \tag{4A.6.2}$$

unde \perp_ς este legea de compunere externă a mulțimii M , omoloagă cu legea T a grupului G .

Fie l_i ordinul matricilor pătrate ale reprezentării Γ_i (numit de asemenea și *dimensiune a reprezentării Γ_i*). În cazul în care există un întreg n , astfel încât: $1 \leq n < l_i$, iar pentru orice $j = n + 1, \dots, l_i$, $k = 1, 2, \dots, l_i$ și pentru valori nelule arbitrare v_1, v_2, \dots, v_n avem:

$$[\Gamma_i(\hat{U}_k)] \begin{pmatrix} v_1 \\ \dots \\ v_n \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} J_j = 0, \quad (4A.6.3)$$

(deci transformările descrise de matricile reprezentării mențin vectorii n-dimensionali ($n < l_i$) în același spațiu), atunci Γ_i este o *reprezentare reductibilă*.

În cazul în care o reprezentare matricială Γ_i poate fi obținută pornind de la alte reprezentări matriciale, cu ajutorul unor compuneri permise de structura algebrică a mulțimii de matrici a reprezentării considerate [spre exemplu, dacă pentru orice $k = 1, 2, \dots, l_i (= l_m = l_n)$]:

$$\Gamma_i(\hat{U}_k) = \Gamma_m(\hat{U}_k)\Gamma_n(\hat{U}_k) \quad (4A.6.4),$$

Γ_i este o *reprezentare echivalentă cu reprezentările* (spre exemplu Γ_m, Γ_n) *care au condus la obținerea sa*.

Suma elementelor diagonale ale unei matrici a reprezentării:

$$\sum_{j=1}^{l_i} [\Gamma_i(\hat{U}_k)]_{jj} = \chi_{ik} \quad (4A.6.5)$$

este numită *urma (caracterul) matricii asociate operației de simetrie* \hat{U}_k *în reprezentarea* Γ_i .

Problem 4A.6.1: Considerăm 2 elemente conjugate $\hat{U}_\alpha, \hat{U}_\beta$ ale grupului de simetrie G . Arătați că urmele (caracterele) matricilor asociate acestor elemente, pentru orice reprezentare matricială Γ_i , sunt egale: $\chi_{i\alpha} = \chi_{i\beta}$.

Rezolvare: În conformitate cu definiția elementelor conjugate ale unui grup G (v. relația (4A.4.7)), există un element $\hat{U}_\gamma \in G$ astfel încât: $\hat{U}_\beta = \hat{U}_\gamma^{-1} \hat{U}_\alpha \hat{U}_\gamma$. Rezultă că:

$$\begin{aligned} \chi_{i\beta} &= \sum_{j,l,m} [\Gamma_i(\hat{U}_\gamma^{-1})]_{jl} [\Gamma_i(\hat{U}_\alpha)]_{lm} [\Gamma_i(\hat{U}_\gamma)]_{mj} = \\ &= \sum_{l,m=1}^{l_i} \{ [\Gamma_i(\hat{U}_\alpha)]_{lm} \sum_{j=1}^{l_i} [\Gamma_i(\hat{U}_\gamma)]_{mj} [\Gamma_i(\hat{U}_\gamma^{-1})]_{jl} \} = \\ &= \sum_{l,m=1}^{l_i} [\Gamma_i(\hat{U}_\alpha)]_{lm} \delta_{lm} = \chi_{i\alpha} . \end{aligned}$$

Deoarece rezolvarea multor probleme de Fizică simplificate de teoria grupurilor necesită doar cunoașterea urmelor (caracterelor) matricilor reprezentării, vom indica în continuare *teoremele reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente* (v. de asemenea [8],[9],[3]):

(i) numărul reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente ale unui grup simetrie este egal cu numărul N_c al claselor grupului,

(ii) suma pătratelor dimensiunilor reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente este egal cu ordinul h al grupului:

$$\sum_{i=1}^{N_c} l_i^2 = h, \quad (4A.6.6)$$

(iii) vectorii formați - pentru fiecare reprezentare ireductibilă a mulțimii de reprezentări neechivalente – de valorile urmelor (caracterelor) matricilor asociate fiecărei operații a grupului de simetrie sunt ortonormate:

$$\sum_{j=1}^h \chi_{ik} \chi_{jk} = h \cdot \delta_{ij} , \quad (4A.6.7)$$

(iv) numărul n_i al reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente de tipul Γ_i incluse de o reprezentare reductibilă arbitrară Γ este dat de expresia:

$$n_i = \frac{1}{h} \sum_{k=1}^h \chi_{ik} \chi(\hat{U}_k) , \quad (4A.6.8)$$

unde $\chi(\hat{U}_k)$ este urma (caracterul) matricii asociate operației de simetrie \hat{U}_k pentru reprezentarea reductibilă Γ .

Reprezentarea matricială care descrie transformările coordonatelor tuturor punctelor materiale ale sistemului studiat (la aplicarea diferitelor operații de simetrie) este *reprezentarea completă* a acestui sistem.

Ținând seama că:

(i) matricile care corespund rotației $R(\varphi)$ cu unghiul φ respectiv unei rotații cu unghiul φ , urmată de oglindirea în planul perpendicular pe axa de rotație: $S(\varphi)$ sunt:

$$\overline{\overline{R}}(\varphi) = \begin{vmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \text{ respectiv: } \overline{\overline{S}}(\varphi) = \begin{vmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (4A.6.9)$$

deci contribuția fiecărui punct material al sistemului aflat pe un element de simetrie de tipul $C(\varphi)$ sau – respectiv - $S(\varphi)$, la valoarea urmei (caracterului) operației de simetrie corespunzătoare pentru reprezentarea completă este:

$$\Delta \chi_c [\hat{R}(\varphi)] = 2 \cos \varphi + 1, \text{ respectiv: } \Delta \chi_c [\hat{S}(\varphi)] = 2 \cos \varphi - 1 \quad (4A.6.10)$$

rezultă că *urmele (caracterele) corespunzând reprezentării complete* sunt:

$$\chi_c [\hat{R}(\varphi)] = N_c (2 \cos \varphi + 1), \text{ respectiv: } \chi_c [\hat{S}(\varphi)] = N_s (2 \cos \varphi - 1) \quad (4A.6.11)$$

unde N_c și N_s sunt numerele de particule ale sistemului (puncte materiale) aflate pe elementele $C(\varphi)$ și – respectiv - $S(\varphi)$.

Problema 4A.6.2: Considerăm molecula de amoniac, a cărei configurație de echilibru are forma unei piramide triunghiulare regulate.

Deduceți:

a) urmele (caracterele) reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente ale grupului punctual C_{3v} , care corespunde configurației de echilibru a moleculei de amoniac,

b) clasificarea – după aceste reprezentări matriciale ireductibile – a celor 12 evoluții diferite corespunzând celor 4 atomi ai moleculei de amoniac.

Rezolvare: a) Analiza tabelului de multiplicare al grupului C_{3v} (întrucâtva asemănător Tabelii 4A.2) arată că clasele acestui grup sunt: I (identitatea), C_3 (format de cele două rotații permise:

\hat{C}_3 și \hat{C}_3^2) și σ_v (corespunzând celor 3 plane și operații de oglindire: $\sigma_{v1}, \sigma_{v2}, \sigma_{v3}$, v. Figura 4A.16). În conformitate cu prima teoremă a reprezentărilor matriciale ale grupurilor de simetrie (v. mai sus), numărul reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente ale grupului C_{3v} este egal cu numărul claselor sale de simetrie: $N_{i.n.r.} = N_c = 3$.

Deoarece numărul operațiilor de simetrie ale grupului C_{3v} este egal cu: $h=1(I)+2(C_3)+3(\sigma_v)=6$, cea de a doua teoremă a reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente capătă următoarea expresie particulară: $l_1^2+l_2^2+l_3^2=6$. Întrucât l_1, l_2, l_3 sunt întregi pozitivi, singura soluție a ecuației de mai sus este: $l_1=l_2=1$ și $l_3=2$, deci grupul C_{3v} admite două reprezentări matriciale ireductibile neechivalente unidimensionale (simboluri A_1 și A_2), precum și o reprezentare ireductibilă neechivalentă bidimensională (simbol E). Ținând seama că prima reprezentare matricială ireductibilă neechivalentă unidimensională corespunde scalarilor proprii (precum temperatura, densitatea masei, sarcina electrică s.a.):

$$\chi_1(I) = \chi_1(C_3) = \chi_1(\sigma_v) = +1 .$$

Pe de alta parte, urma (caracterul) identității, corespunzând oricărei reprezentări matriciale coincide - evident - cu dimensiunea reprezentării, deci:

$$\chi_2(I) = 1 \quad \text{și} \quad \chi_3(I) = 2 .$$

În sfârșit, se constată ca a treia teoremă a reprezentărilor ireductibile neechivalente conduce la următoarele ecuații:

$$1 + 2 \times 1 \times \chi_2(C_3) + 3 \times 1 \times \chi_2(\sigma_v) = 0 ,$$

$$1 + 2 \times [\chi_2(C_3)]^2 + 3 \times [\chi_2(\sigma_v)]^2 = 6 ,$$

$$2 + 2 \times 1 \times \chi_3(C_3) + 3 \times 1 \times \chi_3(\sigma_v) = 0$$

$$4 + 2 \times [\chi_3(C_3)]^2 + 3 \times [\chi_3(\sigma_v)]^2 = 6 ,$$

cu soluția unică: $\chi_2(C_3) = 1, \chi_2(\sigma_v) = -1$ (deci că reprezentarea Γ_2 corespunde scalarilor improprii, antisimetrice față de oglindiri σ_v , fiind astfel de tipul A_2) și:

$$\chi_3(C_3) = 1, \chi_3(\sigma_v) = 0 .$$

Ținând seama că numerele de atomi ai moleculei de amoniac (NH_3) care-și păstrează pozițiile (corespunzând configurației de echilibru) după efectuarea diferitelor operații corespunzând grupului de simetrie sunt: $N(I) = 4, N(C_3) = 1$ (atomul de azot) și: $N(\sigma_v) = 2$ (atomul de azot și un atom de hidrogen, v. Figura 4A.17), în timp ce unghiurile de rotație corespunzătoare sunt: $\varphi(I) = 0, \varphi(C_3) = \frac{2\pi}{3}$ radiani, $\varphi(\sigma_v) = 0$, relațiile (4A.6.11) conduc la următoarele caractere ale reprezentării complete a moleculei NH_3 :

$$\chi_c(I) = 4 \times (2 \times 1 + 1) = 12, \chi_c(C_3) = 1 \times (2 \times (-\frac{1}{2}) + 1) = 0, \chi_c(\sigma_v) = 2 \times (2 \times 1 - 1) = 2 .$$

În sfârșit, cea de a patra teoremă a reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente determină numerele de evoluții independente ale moleculei NH_3 care corespund fiecărei reprezentări ireductibile neechivalente:

$$n(A_1) = \frac{1}{6} [1 \times 1 \times 12 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times 2] = 3 ,$$

$$n(A_2) = \frac{1}{6} [1 \times 1 \times 12 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times (-1) \times 2] = 1 \quad \text{și:}$$

$$n(A_3) = \frac{1}{6} [1 \times 2 \times 12 + 2 \times (-1) \times 0 + 3 \times 0 \times 2] = 4 .$$

Caracterele reprezentărilor ireductibile neechivalente, acelea ale reprezentării matriciale complete a moleculei NH_3 , precum și natura evoluțiilor independente corespunzând moleculei

NH_3 , sunt indicate în Tabelul 4A.4. Simbolurile evoluțiilor independente din Tabelul 4A.4 corespund translațiilor T_x, T_y , (în planul ortogonal pe axa C_3), rotațiilor R_x, R_y, R_z

Tabelul 4A.4. Caracterile reprezentărilor matriciale ireductibile neechivalente ale grupului C_{3v} , acelea ale reprezentării complete a moleculei NH_3 și clasificarea evoluțiilor independente ale moleculei NH_3

Simbolul reprezentării matriciale	Clasa de simetrie			$n_i (NH_3)$	Tipurile evoluțiilor independente ale moleculei NH_3
	I	C_3	σ_v		
A_1	1	1	1	3	T_z, V_1, V_2
A_2	1	1	-1	1	R_z
E	2	-1	0	4	$(T_x, T_y), (R_x, R_y)$ $(V_{3a}, V_{3b}), (V_{4a}, V_{4b})$
$\Gamma_{complete} (NH_3)$	12	0	2	-	Toate cele 12 evoluții independente

în jurul axelor Ox, Oy și Oz (care coincide cu axa C_3) și vibrației de întindere simetrice V_1 , vibrației de deformare simetrice V_2 (v. Figura 4A.18) și altor 4 vibrații, grupate în cele 2 perechi: (V_{3a}, V_{3b}) și (V_{4a}, V_{4b}) , ale căror transformări aparțin reprezentării bidimensionale E .

REFERINȚE

1. **J. P. Elliott, P. G. Dawler** - "Symmetry in Physics", 2 vol., McMillan Press, London, 1979.
2. **I. Munteanu** - "Fizica stării condensate", Editura Hyperion, București, 1995.
3. a) **D. Iordache** - "Noțiuni și metode generale ale fizicii (curs de Fizică, vol.I)", Atel. poligr. Inst. Politehnic București, 1980;
b) **D. Iordache** - Bull. Polytechn. Inst. Bucharest, 38(3)23(1976).
4. **O. Bolgiu** - "Cristalografie", Editura tehnică, București, 1974.
5. **I. Pop, V. Niculescu** - "Structura corpului solid. Metode fizice de studiu", Editura Academiei, București, 1971.
6. **C. Moțoc** - "Condensed Matter Physics", Publ. House of University "Politehnica" Bucharest, 1993.
7. **A. M. Schoenflies** - "Theorie der Kristallstruktur", Borntraeger, Berlin, 1925.
8. **J. Schur** - "Die algebraischen Grundlagen der Darstellungstheorie der Gruppen", Frey und Kretz, Zürich, 1936.
9. **E. P. Wigner** - "Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra", Academic Press, New York, 1959.

B. Elemente privind formalismul analitic al fizicii

§4B.1. Noțiuni de bază ale formalismului analitic al fizicii

Numărul evoluțiilor ireductibile ale unui sistem fizic (translații, rotații, oscilații, polarizări, magnetizări ș.a.) este numit *număr al gradelor de libertate ale sistemului* (simbol L). În cazul sistemelor de natură mecanică, numărul gradelor de libertate este egal cu numărul coordonatelor care determină perfect configurația sistemului.

Problema 4B.1: Deduceți numărul gradelor de libertate de: a) translație și rotație, b) oscilație, ale unui sistem mecanic format din N puncte materiale.

Soluție: a) Deoarece – în cazul sistemelor liniare – rotația în jurul axei sistemului este nesemnificativă, numărul gradelor de libertate de translație și rotație este egal cu: (i) 6 în cazul sistemelor neliniare (câte 3 grade de libertate de translație și de rotație), (ii) 5 în cazul sistemelor liniare (doar 2 grade de libertate de rotație).

b) Numărul total al coordonatelor celor N puncte materiale fiind $3N$, numărul gradelor de libertate de oscilație este egal cu: (i) $3N-6$ pentru sistemele neliniare, respectiv: (ii) $3N-5$ pentru sistemele liniare.

Mărimea fizică care descrie una dintre cele l evoluții ireductibile este numită *coordonată generalizată* (simbol q_i). În cazul particular al pendulului matematic, coordonatele generalizate sunt: unghiul sferic θ (“latitudinea geografică”) pentru pendulare, respectiv unghiul sferic φ (“longitudinea geografică”) pentru rotația în jurul verticalei (v.figurile 4B.1a și 4B.1b).

Viteza variației în timp a unei coordonate generalizate: $\frac{dq_i}{dt}$ este numită *viteză generalizată* (simbol \dot{q}_i).

§4B.2. Inducerea ipotezelor de bază ale formalismului analitic al fizicii

Principiile și ecuațiile de bază ale formalismului analitic al fizicii au fost stabilite în decursul a peste 100 ani, aproximativ în durata secolului XVIII și începutul secolului XIX. Dat fiind spațiul limitat al acestui curs, va trebui să folosim frecvent metoda (de altfel, des utilizată în Fizică) inducției incomplete, pentru a regăsi rapid principalele rezultate ale formalismului analitic.

După cum este cunoscut, ecuațiile evoluțiilor de translație, respectiv de rotație, sunt date de legea a doua Newton a dinamicii: $\bar{F} = \frac{d\bar{p}}{dt}$ și relația analoagă pentru mișcarea de rotație: $\bar{M} = \frac{d\bar{L}}{dt}$. Folosind metoda inducției incomplete, este de așteptat ca ecuația evoluției “în lungul” coordonatei generalizate q_i (gradul de libertate i) să fie de forma:

$$\Phi_i = \frac{d\Pi_i}{dt}, \quad (4B.2.1)$$

unde Φ_i și Π_i sunt *forța generalizată*, respectiv *impulsul generalizat* asociat coordonatei generalizate q_i (**ipoteza 1 a formalismului analitic al fizicii**).

Pentru a identifica (de asemenea prin metoda inducției incomplete) expresiile impulsului generalizat și – respectiv – forței generalizate, vom porni de la rezultatele obținute în cadrul problemei 2.2.3 cu privire la expresiile vitezei și accelerației în cazul mișcării plane (v.figura 4B.2):

$$\bar{v} = \dot{r} \cdot \bar{l}_r + r \dot{\theta} \cdot \bar{l}_\theta, \quad \bar{a} = (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) \bar{l}_r + (r\ddot{\theta} + 2\dot{r}\dot{\theta}) \bar{l}_\theta \quad (4B.2.2)$$

În cazul gradului de libertate azimutal: $q_i = \theta$, se constată posibilitatea de a identifica forța generalizată și impulsul generalizat corespunzător, pornind de la componenta azimutală F_θ a forței:

$$\varphi_\theta = r \cdot F_\theta = m(r^2\ddot{\theta} + 2r \cdot \dot{r}\dot{\theta}) = \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) \quad (4B.2.3)$$

Se obține astfel:

$$\varphi_\theta = m(r^2\ddot{\theta} + 2r \cdot \dot{r}\dot{\theta}), \text{ și: } \Pi_\theta = mr^2\dot{\theta} \quad (4B.2.4)$$

Relația dintre forța generalizată și componenta radială F_r a forței este mai complicată:

$$\varphi_r = F_r + mr\dot{\theta}^2, \text{ unde: } \varphi_r = m\dot{r} = \frac{d}{dt}(m\dot{r}) \quad (4B.2.5)$$

Rezultă expresia de mai jos a impulsului generalizat asociat gradului de libertate radial:

$$\Pi_r = m\dot{r} \quad (4B.2.6)$$

Având în vedere importanța deosebită a mărimii fizice “energie” în fizică, element deja subliniat în cadrul introducerii mărimilor primitive ale mecanicii, vom căuta o expresie care să generalizeze rezultatele date de ecuațiile (4B.2.4) și (4B.2.6), pornind de la expresia energiei cinetice a unui punct material aflat în mișcare plană (v. și relația (4B.2.2a)):

$$E_c = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \quad (4B.2.7)$$

Se constată că:

$$\Pi_\theta = \frac{\partial E_c}{\partial \dot{\theta}} \text{ și: } \Pi_r = \frac{\partial E_c}{\partial \dot{r}} \quad (4B.2.8)$$

rezultate care pot fi generalizate prin inducție incompletă în forma:

$$\Pi_i = \frac{\partial P(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial \dot{q}_i} \quad (4B.2.9)$$

unde $P(q_i, \dot{q}_i, t)$ este *potențialul impulsurilor generalizate*, dat printr-o funcție de ansamblele coordonatelor, respectiv vitezelor generalizate:

$$q_i \equiv \{q_1, q_2, \dots, q_L\}, \quad \dot{q}_i \equiv \{\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_L\}.$$

Deoarece:

$$P(q_i, \dot{q}_i, t) = P_o(q_i, t) + P_1(q_i, \dot{q}_i, t),$$

unde $P_1(q_i, \dot{q}_i, t)$ este *potențialul efectiv al impulsurilor generalizate*, relația (4B.2.9) poate fi scrisă în forma echivalentă:

$$\Pi_i = \frac{\partial P_1(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial \dot{q}_i} \quad (4B.2.10)$$

(ipoteza a doua a formalismului analitic al fizicii).

În fine, expresiile (4B.2.4) și (4B.2.5) ale forțelor generalizate φ_θ și φ_r pot fi sintetizate în forma:

$$\varphi_i = Q_i + \frac{\partial P_1(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial q_i} \quad (4B.2.11)$$

unde Q_i este *forța generalizată de interacțiune*, iar $\frac{\partial P_1(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial q_i}$ este în mecanică – *forța generalizată de inerție (ipoteza a treia a formalismului analitic al fizicii).*

Cele 3 ipoteze de bază ale formalismului analitic al fizicii (date de relațiile (4B.2.1), (4B.2.10) și (4B.2.11)) pot fi sintetizate prin ecuațiile Lagrange de speța 1:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial P_1(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial \dot{q}_i} \right) = Q_i + \frac{\partial P_1(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial q_i}, \text{ (unde } i=1, 2, \dots, L) \quad (4B.2.12)$$

Soluțiile sistemului format de cele L ecuații diferențiale de ordinul 2 (de speța 1) ale lui Lagrange vor include $2L$ constante de integrare. Pentru determinarea univocă a evoluției sistemului fizic studiat, aceste $2L$ constante vor trebui calculate cu ajutorul a $2L$ condiții inițiale sau/și finale de tipul: a) condițiilor care determină complet starea cinematică inițială (sau finală):

$$q_i(t_0) = q_{0i}, \dot{q}_i(t_0) = \dot{q}_{0i}, \text{ (} i=1, 2, \dots, L) \quad (4A.2.13)$$

b) condițiilor care determină complet configurațiile statice inițială și finală:

$$q_i(t_0) = q_{0i}, \quad q_i(t_f) = q_{fi}, \text{ (} i=1, 2, \dots, L) \quad (4A.2.14)$$

sau altele echivalente. Se constată astfel că **sistemul ecuațiilor Lagrange de speța I-a este echivalent cu principiul determinismului clasic**, deoarece cunoașterea completă a unei stări cinematische (inițială sau finală) determină univoc evoluția sistemului, atât din trecut spre starea considerată, cât și în viitor.

Dupa cum se constată, ecuațiile Lagrange de speța I-a corespund cazului general al sistemelor disipative. Deoarece descrierea evoluției se simplifică sensibil în cazul sistemelor conservative, vom studia în continuare noțiunile și ecuațiile specifice acestor sisteme.

§4B.3. Expresiile forțelor generalizate de interacțiune pentru sisteme mecanice conservative

Fie $\bar{F} (F_1, F_2, \dots, F_{3N})$ - vectorul componentelor forțelor care acționează asupra a N puncte materiale:

$$F_1 = F_{x1}, \quad F_2 = F_{y1}, \quad F_3 = F_{z1}, \quad F_4 = F_{x2}, \dots, F_{3N} = F_{zN},$$

iar $\bar{X} (X_1, X_2, \dots, X_{3N})$ - vectorul de poziție al ansamblului celor N puncte materiale:

$$X_1 = x_1, \quad X_2 = y_1, \quad X_3 = z_1, \quad X_4 = x_2, \dots, X_{3N} = z_N.$$

Deoarece coordonatele generalizate (în cadrul cărora pot fi incluse coordonatele centrului de masă al sistemului – care caracterizează translațiile sistemului, unghiurile Euler care determină poziția axelor principale de inerție – descriind rotațiile sistemului ș.a.m.d.) determină perfect configurația sistemului, în cazul unor deplasări extrem de mici (diferențiale) avem:

$$dX_j = \sum_{i=1}^L a_{ji} dq_i, \quad (4B.3.1)$$

unde coeficienții a_{ji} depind de configurația sistemului.

Sistemul fiind conservativ, avem: $dQ = 0$ (nu se disipă energie sub forma de căldură), deci:

$$dU = -dL = -\sum_j F_j \left(\sum_i a_{ji} dq_i \right) = -\sum_i \left(\sum_j F_j a_{ji} \right) dq_i = -\sum_{i=1}^{3N} Q_i dq_i \quad (4B.3.2)$$

Alegând deplasările astfel încât: $dq_i = dq_j \delta_{ij}$ (unde δ_{ij} este simbolul lui Kronecker), se constată că pentru sistemele mecanice conservative:

$$Q_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} \quad (4B.3.3)$$

unde – în mecanică - $U(q_i, t)$ este *energia potențială (de interacțiune)*.

§4B.4. Definiția funcției lui Lagrange. Ecuațiile lui Lagrange de speța a doua

Admițând (prin inducție incompletă) valabilitatea relației (4B.3.3) și pentru sisteme fizice de altă natură, se poate defini *funcția lui Lagrange* prin relația:

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = P_1(q_i, \dot{q}_i, t) - U(q_i, t) \quad (4B.4.1)$$

Deoarece:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial P_1}{\partial \dot{q}_i}, \text{ iar: } \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{\partial P_1}{\partial q_i} - \frac{\partial U}{\partial q_i} = Q_i + \frac{\partial P_1}{\partial q_i}, \quad (4B.4.2)$$

reiese că – pentru sisteme conservative – ecuațiile Lagrange de speța I-a (4B.2.12) se particularizează în ecuațiile lui Lagrange de speța a doua:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad (i=1, 2, \dots, L) \quad (4B.4.3)$$

Se constată ușor că ecuațiile Lagrange de speța a doua formează de asemenea un sistem de L ecuații diferențiale de ordinul 2, ale căror soluții sunt determinate univoc de $2L$ condiții inițiale sau/și finale.

§4B.5. Inducerea principiului lui Hamilton

Considerăm spațiul fictiv $l+1$ dimensional al coordonatelor:

$$\{q_i | i = 1, l\}$$

și timpului (v.figura 4B.5). Evident, fiecare punct din acest spațiu reprezintă configurația sistemului la momentul respectiv. Se pune acum problema traseului (din spațiul configurațiilor și timpului) pe care evoluează sistemul între configurațiile

$$S_i \text{ (la momentul initial } t_i) \text{ și } S_f \text{ (la momentul " final" } t_f).$$

În figura 4B.5, traiectoria evoluției reale (fizice) a sistemului între cele 2 stări considerate mai sus este reprezentată printr-o curbă continuă, în timp ce o traiectorie imaginară (virtuală) între aceleași stări (relativ apropiată de traiectoria reală) este reprezentată printr-o curbă întreruptă. Vom nota prin:

$$q_i(t) \text{ și } q_i(t) + \delta q_i(t)$$

coordonatele generalizate ($i=1, 2, \dots, l$) care corespund traiectoriei reale, respectiv traiectoriei virtuale la momentul t . Conform ecuațiilor lui Lagrange de speța a doua (v. mai sus), avem:

$$\sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \delta q_i dt = 0 \quad (4B.5.1)$$

Calculând “prin părți” integrala corespunzând celui de al doilea termen de mai sus, se obține:

$$0 = \sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \delta q_i dt - \sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \delta q_i d \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \delta q_i dt - I + \sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot d(\delta q_i) \quad ,$$

unde:

$$I = \sum_{i=1}^l \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \delta q_i \Big|_{t_i}^{t_f} \quad .$$

Deoarece, la momentele inițial și final, cele 2 configurații considerate sunt cunoscute exact, avem:

$$\delta q_i(t_i) = \delta q_i(t_f) = 0$$

pentru orice $i=1,2,\dots,l$. Reiese că $I=0$, deci:

$$\sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{d}{dt}(\delta q_i) \right] dt = 0 \quad (4B.5.2)$$

Întrucât modificarea (δq) traiectoriei de evoluție în spațiul configurațiilor și timpului, respectiv variația timpului (dt) sunt operații independente, ordinea efectuării lor poate fi inversată:

$$\frac{d}{dt}(\delta q_i) = \delta \left(\frac{dq_i}{dt} \right) = \delta \dot{q}_i \quad ,$$

astfel încât relația (4B.5.2) devine:

$$\sum_{i=1}^l \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \delta \dot{q}_i \right] dt = 0 \quad (4B.5.3)$$

Având în vedere expresia diferențialei unei funcții de mai multe variabile:

$$df(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot dx_i \quad (4B.5.4)$$

precum și independența sumării peste gradele de libertate, integrării în timp și modificării δq a traiectoriei, relația (4B.5.3) capătă forma:

$$\int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^l \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \delta \dot{q}_i \right] dt = \int_{t_i}^{t_f} \delta L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = \delta \int_{t_i}^{t_f} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = 0 \quad (4B.5.5)$$

Definind *acțiunea mecanică a lui Hamilton* prin relația:

$$S_H = \int_{t_i}^{t_f} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \quad (4B.5.6)$$

reiese că, **pentru traiectoria reală de evoluție, în spațiul configurațiilor și timpului, valoarea acțiunii Hamilton este** (față de traiectoriile virtuale învecinate) **minimă, maximă sau constantă** (nu depinde de traiectoria evoluției):

$$S_H = \begin{cases} \text{minima} & (\text{cazul cel mai frecvent}), \\ \text{maxima}, \\ \text{constantă}. \end{cases} \quad (4B.5.7)$$

Acest rezultat corespunde **enunțului principiului lui Hamilton**. Deoarece pentru marea majoritate a evoluțiilor fizice, acțiunea mecanică a lui Hamilton este minimă, principiul lui Hamilton este numit și **principiul minimei acțiuni**.

Problema 4B.5.1: Se consideră căderea liberă a unui punct material, de masă m , între cotele:

$$z_i = g \cdot \tau^2 / 2, \text{ la momentul } t_i = 0 \text{ si - respectiv: } z_f = 0, \text{ la momentul } t_f = \tau.$$

Să se verifice că valoarea acțiunii Hamilton care corespunde ecuației reale a căderii libere:

$$z_2(t) = c + d \cdot t^2,$$

este mai mică decât valorile acțiunii mecanice a lui Hamilton, care corespund evoluțiilor virtuale:

$$z_1 = a + b \cdot t, \text{ respectiv: } z_3 = e + f \cdot t^3.$$

Rezolvare: Pornind de la condițiile:

$$z_1(0) = z_2(0) = z_3(0) = z_i \quad \text{si:} \quad z_1(\tau) = z_2(\tau) = z_3(\tau) = z_f,$$

se obțin expresiile:

$$a = c = e = \frac{g}{2} \cdot \tau^2, \quad \text{respectiv:} \quad b = -\frac{g\tau}{2}, \quad d = -\frac{g}{2} \quad \text{si:} \quad f = -\frac{g}{2\tau}$$

Se constată că ecuațiile care corespund căderilor libere virtuale, respectiv reală sunt:

$$z_1(t) = \frac{g\tau}{2}(\tau - t), \quad z_2(t) = \frac{g}{2}(\tau^2 - t^2) \quad \text{si:} \quad z_3(t) = \frac{g}{2}\left(\tau^2 - \frac{t^3}{\tau}\right),$$

deci vitezele de cădere sunt:

$$\dot{z}_1(t) = -\frac{g\tau}{2}, \quad \dot{z}_2(t) = -gt, \quad \text{respectiv:} \quad \dot{z}_3(t) = -\frac{3gt^2}{2\tau}$$

Din relația (4B.4.1), reiese că funcția lui Lagrange corespunzând unui punct material într-un câmp gravitațional uniform este:

$$L(z, \dot{z}, t) = \frac{m}{2} \cdot \dot{z}^2 - mgz$$

În final, se obțin următoarele expresii ale acțiunii mecanice (Hamilton) corespunzând diferitelor evoluții considerate:

$$S_1 = \int_0^\tau \frac{m}{2} (\dot{z}_1^2 - 2gz_1(t)) dt = -\frac{mg^2\tau^3}{8}, \quad S_2 = \int_0^\tau \frac{m}{2} (\dot{z}_2^2 - 2gz_2(t)) dt = -\frac{mg^2\tau^3}{6} \quad \text{si:}$$

$$S_3 = \int_0^\tau \frac{m}{2} (\dot{z}_3^2 - 2gz_3(t)) dt = -\frac{3mg^2\tau^3}{20}.$$

Se constată că valoarea acțiunii mecanice S_2 (corespunzând ecuației reale a căderii libere) este mai mică decât valorile acțiunilor mecanice care corespund evoluțiilor virtuale considerate:

$$S_1 > S_3 > S_2.$$

Notă: În cazul căderii libere descrise de evoluția (în general, virtuală):

$$z_n(t) = a_n + b_n t^n, \quad ,$$

se obține:

$$z_n(t) = \frac{g}{2} \left(\tau^2 - \frac{t^n}{n-2} \right), \quad \text{deci:} \quad \dot{z}_n(t) = -\frac{ngt^{n-1}}{2\tau^{n-2}} \quad \text{si:}$$

$$S_n = \int_0^\tau \left(\frac{m}{2} \cdot \dot{z}_n^2 - mgz_n(t) \right) dt = \frac{n(n^2 - 7n + 4)}{8(n+1)(2n-1)} \cdot mg^2\tau^3.$$

Se constată ușor că minimumul funcției $S_n(n)$ de mai sus corespunde evoluției reale: $n=2$.

§4B.6. Proprietățile funcției lui Lagrange

a) Multiplicitatea funcției lui Lagrange

Considerăm funcția:

$$L' = a \cdot L + \frac{dF(q_i, t)}{dt} \tag{4B.6.1}$$

unde a și $F(q_i, t)$ sunt o constantă arbitrară, respectiv o funcție continuă arbitrară de coordonatele generalizate și de timp. Acțiunea Hamilton, corespunzând funcției $L'(q_i, dq_i/dt, t)$ este:

$$S'_H = \int_{t_i}^{t_f} \left[a \cdot L(q_i, \dot{q}_i, t) + \frac{dF(q_i, t)}{dt} \right] dt = a \int_{t_i}^{t_f} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt + F(q_i(t_f), t_f) - F(q_i(t_i), t_i) \quad .$$

Deoarece stările inițială și finală sunt cunoscute exact, avem: $\delta F(q_i(t_f), t_f) = \delta F(q_i(t_i), t_i) = 0$, deci:

$$\delta S'_H = a \cdot \delta \int_{t_i}^{t_f} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = a \cdot \delta S_H = 0 \quad .$$

Reiese că acțiunea S'_H satisface principiul lui Hamilton, deci și lagrangeana $L'(q_i, dq_i/dt, t)$ dată de relația (4B.6.1) descrie evoluția sistemului studiat.

b) Dependența de viteză a lagrangeanei unui punct material aflat în mișcare rapidă (relativistă); dependența relativistă a masei de viteză

Vom nota prin:

$$L(\bar{v}) \text{ și } L_0$$

funcțiile lui Lagrange corespunzând sistemului laboratorului (față de care punctul material se deplasează cu viteza \mathbf{v}), respectiv sistemului “propriu” (solidar legat cu punctul material considerat). Conform principiului lui Hamilton, avem:

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} L(\bar{v}) dt(\bar{v}) = \delta \int_{t_i}^{t_f} L_0 dt_0 = 0,$$

condiții satisfăcute – în cazul general – doar dacă:

$$L(\bar{v}) dt(\bar{v}) = L_0 dt_0.$$

Ținând seamă de efectul relativist de dilatare a duratelor:

$$dt(\bar{v}) = \frac{dt_0}{\sqrt{1-\beta^2}},$$

se obține:

$$L(\bar{v}) = L_0 \cdot \frac{dt_0}{dt(\bar{v})} = L_0 \sqrt{1-\beta^2}.$$

Deoarece, conform principiului de corespondență, expresiile relativiste se particularizează la viteze mici în cele nerelativiste, expresia “asimptotică”, la viteze mici, a funcției lui Lagrange este:

$$\text{Expr. asimpt. } L(\bar{v}) = \frac{L_0}{2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \quad (4B.6.2)$$

Din relațiile (4B.2.4)-(4B.2.9) reiese că potențialul efectiv al impulsurilor generalizate corespunde – pentru un punct material – energiei cinetice, iar la viteze relativ mici:

$$L(\bar{v}) = E_c - U(q_i, t) = \frac{m_0}{2} \cdot v^2 - U(q_i, t) \quad (4B.6.3)$$

Prin identificarea relațiilor (4B.6.2) și (4B.6.3), se obține:

$$L_0 = -m_0 c^2, \text{ deci: } L(\bar{v}) = -m_0 c^2 \sqrt{1-\beta^2} \quad (4B.6.4)$$

Impulsul punctului material poate fi calculat în baza relațiilor (4B.2.10) și (4B.4.1), obținând:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \text{ deci: } \bar{p} = \frac{\partial L}{\partial \bar{v}} = -m_0 c^2 \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \left[\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{1/2} \right] = \frac{m_0 \bar{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Reiese că masa de mișcare a punctului material depinde de viteză conform relației:

$$m(\bar{v}) = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (4B.6.5)$$

c) Dependența de viteză a funcției Lagrange corespunzând unui punct material aflat în mișcare lentă (nerelativistă)

Considerăm referențialele inerțiale R și R' , aflate în mișcare relativă cu viteza (mică) ε , iar M un punct material care se deplasează cu viteza v față de referențialul R . Evident, funcțiile Lagrange ale punctului material față de referențialele R și R' vor fi:

$$L(\bar{v} + \bar{\varepsilon}), \text{ respectiv } L(\bar{v}) \quad (v. \text{si figura 4B.6})$$

Deoarece viteza relativă a celor 2 referențiale alese este presupusă ca fiind relativ mică ($v \ll c$), funcția Lagrange poate fi exprimată prin dezvoltare în serie Taylor astfel:

$$\begin{aligned} L(\bar{v}) \equiv L(v_x, v_y, v_z) &= L(0) + \left(\frac{\partial L}{\partial v_x}\right)_0 \cdot v_x + \left(\frac{\partial L}{\partial v_y}\right)_0 \cdot v_y + \left(\frac{\partial L}{\partial v_z}\right)_0 \cdot v_z + \left(\frac{\partial^2 L}{\partial v_x^2}\right)_0 \cdot \frac{v_x^2}{2} + \dots = \\ &= \sum_{q=0}^1 \bar{c}_q \cdot \bar{v}^q + \sum_{m+n+p=2}^{\infty} c_{mnp} v_x^m \cdot v_y^n \cdot v_z^p \end{aligned} \quad (4B.6.6)$$

În particular:

$$\bar{c}_0 = L(0), \quad \bar{c}_1 = \left(\frac{\partial L}{\partial \bar{v}}\right)_0 \equiv (\text{grad}_{\bar{v}} L)_0 \text{ ș.a.m.d.}$$

Întrucât R și R' sunt referențiale inerțiale, evoluția punctului material față de aceste referențiale va fi descrisă (conform principiului relativității) de lagrangeane din aceeași clasă (4B.6.1), deci:

$$L(\bar{v} + \bar{\varepsilon}) - L(\bar{v}) = \frac{dF(q_i, t)}{dt}, \quad (4B.6.7)$$

condiție care poate fi satisfăcută doar dacă fiecare termen al sumei (4B.6.6) este o derivată totală. Această ultimă cerință este satisfăcută pentru $q=1$:

$$\bar{c}_1(\bar{v} + \bar{\varepsilon} - \bar{v}) = \frac{d}{dt}(\bar{c}_1 \cdot \bar{\varepsilon} t),$$

dar acest termen (de gradul 1 în vectorul viteză) este prezent în expresia lagrangeanei unui punct material doar în cazul unui spațiu anizotrop stânga-dreapta (la oglindiri), spre exemplu în cazul sarcinii electrice aflate într-un câmp magnetic. Deoarece termenii:

$$\sum_{m+n+p=N} [(v_x + \varepsilon_x)^m (v_y + \varepsilon_y)^n (v_z + \varepsilon_z)^p - v_x^m \cdot v_y^n \cdot v_z^p]$$

nu sunt derivate totale pentru $N \geq 3$, în timp ce **pentru medii izotrope** același termen scris pentru $N=2$ este ($\varepsilon \ll v$):

$$\frac{m_0}{2} [(\bar{v} + \bar{\varepsilon})^2 - v^2] \cong m_0 \bar{v} \cdot \bar{\varepsilon} = \frac{d}{dt}(m_0 \bar{r} \cdot \bar{\varepsilon}),$$

reiese că, **pentru evoluții nerelativiste în spații izotrope, lagrangeana unui punct material este o funcție pătratică de viteză.**

d) Raporturile dintre funcția lui Lagrange și energiile “clasice”

Interpretând ecuațiile Lagrange de speța a II-a (ale sistemelor conservative):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i},$$

în sensul primei ipoteze a formalismului analitic, se obține expresia impulsului generalizat corespunzător în acest caz:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (4B.6.8)$$

Reiese că dimensiunea fizică a funcției Lagrange este: $[L] = [p_i] \cdot [dq_i/dt]$. Particularizând pentru coordonatele carteziane, găsim:

$[L]=[p_x v_x]$, deci dimensiunea fizică a funcției Lagrange este cea a unei energii. Pentru a constata dacă vreuna dintre energiile “clasice” (cinetică, potențială sau totală) poate “juca” rolul de funcție Lagrange, considerăm **cazul particular al mișcării unidimensionale** (în lungul axei Ox) **a unui punct material de masă m , într-un câmp de forțe de energie potențială $U(x)$** . În acest caz:

$$E_c = \frac{m}{2} \cdot \dot{x}^2, \text{ iar } : E_t = E_c + U(x) = \frac{m}{2} \cdot \dot{x}^2 + U(x).$$

Se constată că:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial E_c}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{d}{dt} (m\dot{x}) = m\ddot{x} \neq \frac{\partial E_c}{\partial x} = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial U}{\partial \dot{x}} \right) = 0 \neq \frac{\partial U}{\partial x} = -F_x = -m\ddot{x}, \text{ iar } :$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial E_t}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{d}{dt} (m\dot{x}) = m\ddot{x} \neq \frac{\partial E_t}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial x} = -F_x = -m\ddot{x},$$

deci **niciuna dintre energiile “clasice” (cinetică, potențială, totală) nu poate juca rolul de funcție a lui Lagrange, însă ergofuncția $E_t(x, dx/dt, t)$ (dependența energiei totale de coordonate și vitezele generalizate) se apropie cel mai mult de proprietățile funcției Lagrange.**

§4B.7. Inducerea ecuațiilor lui Hamilton. Compatibilitatea sistemelor de ecuații ale lui Hamilton și – respectiv – Lagrange de speța a II-a

Având în vedere că: a) (ergo)funcția care descrie energia totală are proprietățile cele mai apropiate de funcția lui Lagrange corespunzând unui sistem fizic (vezi secțiunea 4B.6d de mai sus), b) energia totală și impulsul unui sistem fizic posedă unele proprietăți remarcabile speciale (teoreme de conservare, ecuații de evoluție ș.a.), reiese că **descrierea evoluției sistemelor fizice prin funcția lui Hamilton $H(q_i, p_i, t)$, care exprimă energia totală a sistemului prin intermediul coordonatelor și – respectiv – impulsurilor generalizate, eventual și de timp), prezintă un interes deosebit**. Pentru a deduce proprietățile funcției lui Hamilton, vom adopta un procedeu inductiv, pornind de la **expresia ergofuncției** (dependenței energiei totale de coordonatele și vitezele generalizate, eventual și de timp) corespunzând unui punct material care efectuează o mișcare nerelativistă în lungul axei Ox, într-un câmp de forță descris de energia potențială $U(x, t)$:

$$E_t(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} \cdot \dot{x}^2 + U(x, t) \quad (4B.7.1)$$

Ținând seamă că impulsul particulei poate fi scris în forma:

$$p = m\dot{x},$$

ecuația (4B.7.1) conduce la expresia funcției lui Hamilton pentru particula în mișcare unidimensională:

$$H(x, p_x, t) = \frac{1}{2m} \cdot p_x^2 + U(x, t) \quad (4B.7.2)$$

Deoarece principalele caracteristici ale dependențelor parametrilor fizici sunt cele diferențiale, principalele proprietăți ale funcției lui Hamilton corespunzând particulei în mișcare unidimensională sunt:

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m} = \dot{x} \quad \text{si} : \quad \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{\partial U}{\partial x} = -F_x = -\dot{p}_x \quad (4B.7.3)$$

Aplicând metoda (uzuală în Fizică) inducției incomplete și ținând seamă că x și p_x reprezintă coordonata, respectiv impulsul generalizat corespunzând mișcării unidimensionale, putem presupune că – pentru un sistem fizic arbitrar:

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \text{iar} : \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad (4B.7.4)$$

obținând astfel așa-numitele **ecuații ale lui Hamilton**.

Pe de altă parte, pentru sistemele închise, energia totală se conservă, deci:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0,$$

iar evoluția nu depinde explicit de timp:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

(spre exemplu, descărcarea unui acumulator ar dura la fel, indiferent de momentul începerii descărcării, dacă acumulatorul este izolat total de exterior). Aplicând din nou metoda inducției incomplete și generalizând pentru sisteme fizice arbitrare constatările particulare (pentru sisteme închise) de mai sus, se obține **ecuația de corelare temporală a funcțiilor Hamilton și Lagrange**:

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \quad (4B.7.5)$$

Desigur, după obținerea prin inducție incompletă a sistemului celor $2l$ (unde l este numărul gradelor de libertate ale sistemului) ecuații dinamice (diferențiale de ordinul 1) ale lui Hamilton, având în vedere că aceste ecuații descriu evoluția sistemului, trebuie studiată compatibilitatea acestui sistem cu acela format de cele l ecuații (diferențiale de ordinul 2) de speța a doua ale lui Lagrange.

După constatarea compatibilității în privința condițiilor inițiale (sau și finale): determinarea univocă a soluțiilor ambelor sisteme necesită același număr ($2l$) de condiții inițiale sau și finale, va fi necesară constatarea compatibilității sistemelor pornind de la expresiile diferențialelor funcțiilor lui Hamilton și – respectiv – Lagrange:

$$dH(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^l \frac{\partial H}{\partial q_i} \cdot dq_i + \sum_{i=1}^l \frac{\partial H}{\partial p_i} \cdot dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} \cdot dt, \quad (4B.7.6)$$

$$dL(q_i, \dot{q}_i, t) = \sum_{i=1}^l \frac{\partial L}{\partial q_i} \cdot dq_i + \sum_{i=1}^l \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \cdot dt, \quad (4B.7.7)$$

Ținând seamă de definiția impulsului generalizat:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i},$$

ecuațiile Lagrange de speța a doua devin:

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

ceace – împreună cu ecuațiile Hamilton (4B.7.4) – conduce la următoarele expresii ale diferențialelor celor 2 funcții:

$$dH(q_i, p_i, t) = -\sum_{i=1}^l \dot{p}_i dq_i + \sum_{i=1}^l \dot{q}_i dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} \cdot dt \quad (4B.7.8)$$

și:

$$dL(q_i, \dot{q}_i, t) = \sum_{i=1}^l \dot{p}_i dq_i + \sum_{i=1}^l p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \cdot dt \quad (4B.7.9)$$

Adunând membru cu membru relațiile (4B.7.8) și (4B.7.9) și luând în considerație ecuația (4B.7.5) de corelare temporală a funcțiilor Hamilton și Lagrange, obținem:

$$d(H + L) = \sum_{i=1}^l (\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i) + \left(\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial t} \right) dt = d \left(\sum_{i=1}^l p_i \dot{q}_i \right) \quad (4B.7.10)$$

Relația (4B.7.10) arată că ecuațiile lui Hamilton și – respectiv – Lagrange sunt compatibile dacă, până la o constantă arbitrară de integrare, între funcțiile Lagrange și Hamilton există **relația (de corelare generală a funcțiilor Lagrange și Hamilton):**

$$H(q_i, p_i, t) + L(q_i, \dot{q}_i, t) = \sum_{i=1}^l \dot{q}_i p_i \quad (4B.7.11)$$

Problema 4B.7: Deduceți expresia relativistă a energiei totale a unui punct material, în baza formalismului analitic al fizicii.

Soluție: Pornind de la expresia funcției lui Lagrange care corespunde mișcărilor relativiste ale unui punct material (v.relația (4B.6.4)) și ținând seamă că pentru un punct material: $dq_i/dt=v_i$ ($i=x,y,z$), obținem:

$$H(\bar{v}) = \bar{p} \cdot \bar{v} + m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} = \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = m(\bar{v}) \cdot c^2 \quad (4B.7.12)$$

§4B.8. Deducerea semnificației fizice a funcției lui Lagrange pentru evoluții nerelativiste în spații izotrope. Expresia finală a ecuațiilor lui Lagrange de speța a I-a

Pornind de la definițiile componentelor “statice”, respectiv “cinematice” ale funcțiilor Hamilton, respectiv Lagrange:

$$H(q_i, p_i, t) = T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t) + U(q_i, t), \quad (4B.8.1)$$

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = \tau(q_i, \dot{q}_i, t) + \nu(q_i, t), \quad (4B.8.2)$$

precum și de la expresia corespunzătoare a impulsurilor generalizate:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \quad (4B.8.3)$$

relația (4B.7.11) de corelare generală a acestor funcții capătă forma:

$$T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t) + U(q_i, t) = \sum_{i=1}^l \dot{q}_i \cdot \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - T(q_i, \dot{q}_i, t) - U(q_i, t) \quad (4B.8.4)$$

Generalizând pentru evoluții arbitrare constatarea (v.și secțiunea 4B.6c) că - pentru evoluții nerelativiste în spații izotrope – lagrangeana unui punct material este o funcție pătratică de viteză și observând că funcția $\tau(q_i, dq_i/dt, t)$ este partea lagrangeanei care depinde efectiv de vitezele generalizate, vom aplica teorema lui Euler funcției omogene $\tau(q_i, dq_i/dt, t)$ de ordinul 2 în dq_i/dt , obținând:

$$\sum_{i=1}^l \dot{q}_i \frac{\partial \tau}{\partial \dot{q}_i} = 2\tau(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (4B.8.5)$$

Relația (4B.8.4) devine:

$$T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t) + U(q_i, t) = \tau(q_i, \dot{q}_i, t) - \nu(q_i, t)$$

Pentru $dq_i/dt=0$, se obține: $\nu(q_i, t) = -U(q_i, t)$ și, în final:

$$\tau(q_i, \dot{q}_i, t) = T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t)$$

Reiese că expresia lagrangeanei corespunzând evoluțiilor nerelativiste în spații izotrope este:

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t) - U(q_i, t) \quad (4B.8.6)$$

Desigur, în cazul sistemelor mecanice, părțile funcției Hamilton care nu depind, respectiv depind de vitezele generalizate au semnificațiile de energie potențială (de interacțiune), respectiv energie cinetică:

$$L_{mec.}(q_i, \dot{q}_i, t) = E_c - E_{int}. \quad (4B.8.6')$$

În cazul general al unor sisteme fizice arbitrare, funcțiile T și U au semnificații diferite ca în mecanică. Astfel, în cazul circuitelor LC serie, respectiv derivație, drept coordonate generalizate pot fi alese: sarcina Q (de pe o armătură a condensatorului), respectiv fluxul magnetic Φ_m (prin bobina L). Deoarece expresiile energiilor totale ale circuitelor LC serie, respectiv derivație pot fi scrise:

$$\text{Circuitul } LC \text{ serie:} \quad H(Q, \dot{Q}) = \frac{Q^2}{2L} + \frac{L\dot{Q}^2}{2}, \quad (4B.8.7)$$

$$\text{Circuitul } LC \text{ derivație:} \quad H(\Phi_m, \dot{\Phi}_m) = \frac{1}{2L} \cdot \Phi_m^2 + \frac{C}{2} \cdot \dot{\Phi}_m^2 \quad (4B.8.8)$$

constatăm că funcția $U(q_i, t)$ poate fi identificată cu energia electrostatică acumulată în condensator în cazul circuitului serie, respectiv cu energia acumulată în bobină în cazul circuitelor derivație și invers, pentru funcția $T(q_i, dq_i/dt \rightarrow p_i, t)$.

Comparând definiția funcției lui Lagrange (v. paragraful 4B.4):

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = P_1(q_i, \dot{q}_i, t) - U(q_i, t) \quad (4B.8.9)$$

cu expresia nerelativistă (4B.8.6) dedusă mai sus, poate fi identificat potențialul efectiv al impulsurilor generalizate prin partea funcției lui Hamilton care depinde de impulsurile (și, implicit, de vitezele) generalizate:

$$P_1(q_i, \dot{q}_i, t) = T(q_i, \dot{q}_i \rightarrow p_i, t) \quad (4B.8.10)$$

În acest mod, obținem **expresia direct utilizabilă a ecuațiilor Lagrange de speța a I-a** (v. și paragraful 4B.2):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial T}{\partial q_i} + Q_i \quad (4B.8.11)$$

Problema 4B.2: Deduceți ecuația lui Lagrange de speța I-a care corespunde unui circuit RLC serie.

Rezolvare: Deoarece mărimea fizică având aceeași valoare pentru cele 3 elemente R , L și C ale acestui circuit este intensitatea curentului: $I = dQ/dt$, coordonata generalizată corespunzătoare va fi sarcina Q de pe o armătură a condensatorului, iar partea funcției Hamilton (energiei totale) a sistemului care depinde de viteza generalizată va fi energia acumulată în bobină:

$$T = \frac{L\dot{Q}^2}{2}.$$

Reiese că primul termen al ecuației Lagrange de speța I-a corespunzătoare:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{Q}} \right) = \frac{d}{dt} (L\dot{Q}) = \frac{d\Phi_m}{dt}$$

reprezintă tensiunea indusă în bobină, forța generalizată Q_i având astfel semnificația:

$$L\ddot{Q} = L \cdot \frac{d^2 Q}{dt^2} = U_0 \sin \omega t - R\dot{Q} - \frac{Q}{C}.$$

§4B.9. Ecuația de evoluție a unui parametru fizic arbitrar. Parantezele lui Poisson

Fie un parametru fizic arbitrar a cărui dependență de coordonatele și impulsurile generalizate, respectiv de timp, este dată de funcția $f(q_I, p_I, t)$.

Ținând seamă de ecuațiile lui Hamilton (4B.7.4), viteza de variație în timp a parametrului fizic f poate fi scrisă în forma:

$$\frac{df(q_I, p_I, t)}{dt} = \sum_{i=1}^l \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \cdot \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{dp_i}{dt} \right] + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{i=1}^l \left[\frac{\partial H}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (4B.9.1)$$

Definind paranteza Poisson a doi parametri fizici arbitrari, ale căror dependențe de coordonatele și impulsurile generalizate, respectiv de timp, sunt descrise de funcțiile $f(q_I, p_I, t)$ și $g(q_I, p_I, t)$, în baza relației:

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^l \left[\frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial q_i} \right] \quad (4B.9.2)$$

putem scrie **ecuația evoluției unui parametru fizic arbitrar** $f(q_I, p_I, t)$ în forma:

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (4B.9.3)$$

În cazul în care parametrul fizic studiat nu depinde explicit de timp (spre exemplu, cazul unei coordonate generalizate, al unui impuls generalizat, în particular al momentului cinetic:

$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}) : f = f(q_i, p_i), \text{ deci : } \frac{\partial f}{\partial t} = 0 ,$$

ecuația de evoluție capătă forma simplificată:

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} \quad (4B.9.4)$$

Se constată că paranteza Poisson $\{H, f\}$ are semnificația fizică de viteză de variație în timp implicită (prin intermediul coordonatelor și impulsurilor generalizate) a parametrului fizic $f(q_I, p_I, t)$, coincidând cu însăși viteza de variație în timp a respectivului parametru, dacă acesta nu depinde explicit de timp: $\partial f / \partial t = 0$.

Mărimile fizice $f(q_I, p_I, t)$, $g(q_I, p_I, t)$, a căror paranteză Poisson este egală cu 1: $\{f, g\} = 1$, se numesc **mărimi canonic conjugate**. Menționăm că expresia uzuală a relațiilor de nedeterminare ale lui Heisenberg este dată tocmai pentru perechile de mărimi fizice canonic conjugate.

Exercițiu: Demonstrați următoarele proprietăți ale parantezelor Poisson:

a) $\{f, C\} = 0$, pentru $C = \text{constantă}$, (4B.9.5)

b) $\{g, f\} = -\{f, g\}$, (4B.9.6)

c) $\{f, g, h\} = f\{g, h\} + g\{f, h\}$, (4B.9.7)

d) $\left\{ f, \sum_{i=1}^l c_i g_i \right\} = \sum_{i=1}^l c_i \{f, g_i\}$, dacă c_i sunt constante, (4B.9.8)

e) $\frac{d}{dt} \{f, g\} = \left\{ \frac{df}{dt}, g \right\} + \left\{ f, \frac{dg}{dt} \right\}$ (4B.9.9)

Problema 4B.3: Arătați că impulsul generalizat p_i și coordonata generalizată q_i aparținând aceluiași grad de libertate formează o pereche de parametri fizici canonic conjugate.

Rezolvare: Pornind de la definiția parantezei Poisson, se constată că:

$$\{p_i, g_i\} = \frac{\partial g}{\partial q_i}, \text{ respectiv : } \{f, q_j\} = \frac{\partial f}{\partial p_j}$$

Din aceste relații, reiese că: $\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$, deci p_i și q_i sunt mărimi canonic conjugate.

§4B.10. Simetrii fizice și teoreme de conservare asociate

a) Uniformitatea timpului. Teorema conservării energiei totale

Spunem că – pentru un anumit sistem fizic – **timpul este uniform** dacă evoluția sistemului nu depinde de momentul la care a început evoluția (spre exemplu, pentru un acumulator electric timpul este uniform dacă durata descărcării sale nu depinde de momentul începerii descărcării). Deoarece evoluția sistemului este descrisă de funcția lui Lagrange: $L(q_i, dq_i/dt, t)$, timpul este uniform dacă: $\partial L/\partial t = 0$. În conformitate cu ultima ecuație a lui Hamilton (a corelării temporale a funcțiilor Lagrange și Hamilton): $\partial H/\partial t = -\partial L/\partial t$, deci pentru un sistem fizic în care timpul este uniform: $\partial H/\partial t = 0$.

În conformitate cu ecuația de evoluție a unui parametru fizic arbitrar $f(q_i, p_i, t)$ (v.relația (4B.9.3)), ecuația evoluției funcției Hamilton este:

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} + \frac{\partial H}{\partial t}$$

Conform definiției parantezelor Poisson (v.relația (4B.9.2)), avem: $\{H, H\} = 0$, deci – **pentru sisteme fizice în care timpul este uniform:**

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

adică **energia totală** (descrisă de funcția lui Hamilton) $f(q_i, p_i, t)$ **se conservă**. Având în vedere faptul că timpul este uniform doar dacă sistemul este izolat (spre exemplu, durata descărcării acumulatorului se scurtează dacă acesta este conectat la un circuit electric), rezultatul obținut era previzibil și calitativ.

b) Omogenitatea spațiului. Teorema conservării impulsului

Spațiul asociat unei probleme fizice (unui sistem fizic aflat în anumite condiții) este numit **omogen** dacă energia (potențială) de interacțiune a sistemului $U(q_i, t)$ nu depinde de poziția centrului de masă al acestuia:

$$\nabla_c U = \frac{\partial U}{\partial x_c} \cdot \bar{1}_x + \frac{\partial U}{\partial y_c} \cdot \bar{1}_y + \frac{\partial U}{\partial z_c} \cdot \bar{1}_z = 0$$

Ecuația de evoluție a impulsului total:

$$\bar{p}_{rez} = \sum_{i=1}^N \bar{p}_i$$

a celor N particule (puncte materiale) ale unui sistem fizic este:

$$\frac{d\bar{p}_{rez}}{dt} = \left\{ H, \sum_{i=1}^N \bar{p}_i \right\} + \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_{i=1}^N \bar{p}_i \right\} = \sum_{i=1}^N \{H, \bar{p}_i\} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \bar{p}_i}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \{H, \bar{p}_i\} \quad (4B.10.1)$$

Problema 4B.4: Deduceți expresia parantezei Poisson:

$$\{H, \bar{p}_j\}, \text{ unde } \bar{p}_j \text{ este impulsul asociat punctului material } j (=1, 2, \dots, N),$$

iar $H(q_i, p_i, t)$ este funcția Hamilton corespunzând sistemului considerat de N puncte materiale.

Rezolvare: Deoarece pentru un sistem de puncte materiale:

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{2} (\dot{x}_j^2 + \dot{y}_j^2 + \dot{z}_j^2) + U(q_i, t)$$

iar energia cinetică a sistemului de puncte materiale nu depinde de coordonatele punctului material:

$$\frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial T}{\partial y_j} = \frac{\partial T}{\partial z_j} = 0$$

și ținând seamă de proprietățile parantezelor Poisson (v. relațiile (4B.9.5)-(4B.9.9)), obținem:

$$\{H, \bar{p}_j\} = \{H, p_{xj} \bar{1}_x + p_{yj} \bar{1}_y + p_{zj} \bar{1}_z\} = \{H, p_{xj}\} \bar{1}_x + \{H, p_{yj}\} \bar{1}_y + \{H, p_{zj}\} \bar{1}_z$$

deci:

$$\{H, \bar{p}_j\} = -\left(\frac{\partial H}{\partial x_j} \cdot \bar{1}_x + \frac{\partial H}{\partial y_j} \cdot \bar{1}_y + \frac{\partial H}{\partial z_j} \cdot \bar{1}_z\right) = -\left(\frac{\partial U}{\partial x_j} \cdot \bar{1}_x + \frac{\partial U}{\partial y_j} \cdot \bar{1}_y + \frac{\partial U}{\partial z_j} \cdot \bar{1}_z\right) = -\nabla_j U = \bar{F}_j, \quad \text{unde } \bar{F}_j$$

este forța care acționează asupra punctului material j .

Ținând seamă de rezultatul problemei 4B.4, ecuația (4B.10.1) devine:

$$\frac{d\bar{p}_{rez}}{dt} = -\sum_{j=1}^N \nabla_j U \quad (4B.10.2)$$

deci viteza variației în timp a componentei x a impulsului rezultat este:

$$\frac{dp_{x,rez.}}{dt} = -\sum_{j=1}^N \frac{\partial U}{\partial x_j} \quad (4B.10.3)$$

Având în vedere că abscisele celor N puncte materiale ale sistemului pot fi exprimate prin abscisa x_c a centrului de masă în baza relațiilor: $x_j = x_c + \xi_j$ ($j=1,2,\dots,N$) și:

$$x_N = x_c - \frac{1}{m_N} \sum_{j=1}^{N-1} m_j \xi_j \quad (4B.10.4)$$

obținem:

$$\frac{\partial}{\partial x_c} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial x_c} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (4B.10.5)$$

deci ecuația (4B.10.3) devine:

$$\frac{dp_{x,rez.}}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x_c} \quad (4B.10.6)$$

Întrucât componentele y și z ale impulsului rezultat vor satisface ecuații anologice ecuației (4B.10.6), se obține:

$$\frac{d\bar{p}_{rez}}{dt} = -\left(\frac{\partial U}{\partial x_c} \cdot \bar{1}_x + \frac{\partial U}{\partial y_c} \cdot \bar{1}_y + \frac{\partial U}{\partial z_c} \cdot \bar{1}_z\right) = -\nabla_c U \quad (4B.10.7)$$

În cazul când spațiul fizic asociat problemei studiate este omogen: $\nabla_c U = 0$, reiese că impulsul rezultat al particulelor sistemului:

$$\bar{p}_{rez} = \sum_{j=1}^N \bar{p}_j$$

se conservă (**teorema conservării impulsului**).

a) Izotropia spațiului. Teorema conservării momentului cinetic

Spațiul asociat unei probleme fizice (unui sistem fizic aflat în anumite condiții) este numit **izotrop** dacă energia (potențială) de interacțiune a sistemului $U(q_i, t)$ nu depinde de componentele (unghiurile) $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ ale vectorului θ - unghiul de rotație (în jurul centrului de masă) al sistemului considerat ca întreg rigid:

$$\nabla_{\theta} = \frac{\partial U}{\partial \theta_x} \cdot \bar{1}_x + \frac{\partial U}{\partial \theta_y} \cdot \bar{1}_y + \frac{\partial U}{\partial \theta_z} \cdot \bar{1}_z = 0$$

Ecuația de evoluție a momentului cinetic total:

$$\bar{L}_{rez} = \sum_{j=1}^N \bar{L}_j$$

al celor N puncte materiale ale sistemului fizic studiat este:

$$\frac{d\bar{L}_{rez}}{dt} = \left\{ H, \sum_{j=1}^N \bar{L}_j \right\} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{j=1}^N \bar{L}_j \right) = \sum_{j=1}^N \{H, \bar{L}_j\} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial \bar{L}_j}{\partial t} = \sum_{j=1}^N \{H, \bar{L}_j\} \quad (4B.10.8)$$

Problema 4B.5: Deduceți expresia parantezei Poisson:

$$\{H, \bar{L}_j\}, \text{ unde } \bar{L}_j \text{ este momentul cinetic al punctului material } j (=1,2,\dots,N),$$

iar $H(q_i, p_i, t)$ este funcția lui Hamilton corespunzând sistemului studiat de N puncte materiale.

Rezolvare: Deoarece pentru un sistem de puncte materiale:

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} (p_{xj}^2 + p_{yj}^2 + p_{zj}^2) + U(q_i, t)$$

ținând seamă de proprietățile parantezelor Poisson (v. relațiile (4B.9.5)-(4B.9.9)), obținem pentru componenta z a parantezei Poisson din enunț:

$$\begin{aligned} \{H, L_{zj}\} &= \{H, x_j p_{yj} - y_j p_{xj}\} = \{H, x_j p_{yj}\} - \{H, y_j p_{xj}\} = \\ &= x_j \{H, p_{yj}\} + p_{yj} \{H, x_j\} - y_j \{H, p_{xj}\} - p_{xj} \{H, y_j\}, \end{aligned}$$

rezultând că:

$$\{H, L_{zj}\} = -x_j \cdot \frac{\partial H}{\partial y_j} + p_{yj} \cdot \frac{\partial H}{\partial x_j} + y_j \cdot \frac{\partial H}{\partial x_j} - p_{xj} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_{yj}} = -x_j \cdot \frac{\partial U}{\partial y_j} + \frac{p_{xj} p_{yj}}{2m_j} + y_j \cdot \frac{\partial U}{\partial x_j} - \frac{p_{xj} p_{yj}}{2m_j}$$

și în final:

$$\{H, L_{zj}\} = x_j F_{yj} - y_j F_{xj} = M_{zj}$$

unde M_{zj} este componenta z a momentului forțelor acționând asupra punctului material j .

Deoarece componentele x și y ale parantezei Poisson din enunț sunt date de expresii similare, reiese că:

$$\{H, \bar{L}_j\} = \{H, L_{xj}\} \bar{1}_x + \{H, L_{yj}\} \bar{1}_y + \{H, L_{zj}\} \bar{1}_z = \bar{M}_{Fj}, \text{ unde } \bar{M}_{Fj} \text{ este momentul forțelor acționând asupra punctului material } j.$$

.....
Înlocuind rezultatul problemei 4B.5 în ecuația (4B.10.8), se obține:

$$\frac{d\bar{L}_{rez}}{dt} = \sum_{j=1}^N \bar{M}_{Fj} = \bar{M}_{\bar{F}_{rez}} = -\nabla_{\bar{\theta}} U \quad (4B.10.9)$$

În cazul când spațiul asociat problemei fizice studiate este izotrop:

$$\nabla_{\bar{\theta}} U = 0$$

reiese că momentul cinetic rezultat al particulelor sistemului:

$$\bar{L}_{rez} = \sum_{j=1}^N \bar{L}_j$$

se conservă (**teorema conservării momentului cinetic**).