

Fiche TQC2 – Quantification canonique

■ Quantification

Procédure de remplacement des quantités classiques par des opérateurs linéaires agissant dans un espace de Hilbert contenant les états physiques du système étudié. On remplace par des opérateurs les coefficients des transformées de Fourier des champs que les relations de commutation canoniques relient aux opérateurs de création et d'annihilation des particules et antiparticules. La quantification des champs de spin entier, correspondant aux bosons (Cf. *théorème de connexion spin-statistique*), s'effectue uniquement par relations de commutation entre opérateurs création et annihilation, celle des champs de spin 1/2 entier, correspondant aux fermions, par relations d'anticommutation.

Les étapes du programme de quantification sont successivement :

- . Définition d'un espace de Hilbert convenable
- . Implémentation des relations de commutation sur cet espace
- . Obtention d'espaces de Hilbert jusqu'à l'espace physique par la ...
 - . Résolution de la contrainte de Gauss
 - . Résolution de la contrainte vectorielle
 - . Résolution de la contrainte scalaire
- . Formulation de prédictions physiques avec des observables.

■ Espace de Fock (*Rappel*) des états macroscopiques entrants et sortants

Leurs états sont composés de particules de quadri-impulsions gérées pour l'état initial où détectées dans l'état final, dans l'espace-temps. La détection et la mesure des processus physiques s'effectuent à l'échelle macroscopique où les particules sont quasi-libres. Ces états appartiennent à l'espace de Fock de la théorie, ils sont construits comme des états de particules libres de caractéristiques quantiques déterminées. L'espace de Fock est l'espace de Hilbert, somme directe des produits d'espaces de Hilbert à une particule.

■ Ordre normal

Un produit d'opérateurs de création et d'annihilation est dans l'ordre normal ou dans l'ordre de Wick quand tous les opérateurs de création sont à gauche de tous les opérateurs d'annihilation.

Noté pour l'opérateur \hat{A} , « : \hat{A} : » ou « $N(\hat{A})$ », l'ordre normal est linéaire :

Pour les opérateurs \hat{A} , \hat{B} , $N(\hat{A} + \hat{B}) = N(\hat{A}) + N(\hat{B})$.

Pour un mode de boson d'opérateur de création \hat{b}^\dagger et d'opérateur d'annihilation \hat{b} , on obtient : : $\hat{b}^\dagger \hat{b}$: = $\hat{b}^\dagger \hat{b}$ et : $\hat{b} \hat{b}^\dagger$: = $\hat{b}^\dagger \hat{b}$.

La relation de commutation des opérateurs bosoniques donne : $\hat{b} \hat{b}^\dagger = \hat{b}^\dagger \hat{b} + 1$.

Pour un mode de fermion d'opérateur de création \hat{f}^\dagger et d'opérateur d'annihilation \hat{f} , on obtient : : $\hat{f}^\dagger \hat{f}$: = $\hat{f}^\dagger \hat{f}$ et : $\hat{f} \hat{f}^\dagger$: = $-\hat{f}^\dagger \hat{f}$.

Ainsi, s'il n'y a qu'un seul fermion, les produits d'ordre supérieur sont nuls car contenant au moins deux opérateurs de création ou d'annihilation.

- **Opérateur temps ordonné**

La valeur du T-produit dans le vide est reliée au propagateur de Feynman du champ électromagnétique. On déplace les pôles du plan complexe en explicitant la propagation des solutions à énergie positive dans le futur et des solutions à énergie négative dans le passé.

Produit au temps ordonné traduisant le fait que toute particule est créée avant d'être annihilée : $T[\varphi(t_1)\psi(t_2)] = \varphi(t_1)\psi(t_2)$ si $t_1 > t_2$ et $\psi(t_2)\varphi(t_1)$ si $t_2 > t_1$.

- **Tenseur énergie** d'un champ φ de dynamique décrite par la densité lagrangienne \mathcal{L}

$$: T^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \partial^\nu \varphi - g^{\mu\nu} \mathcal{L}.$$

Conservation locale (sans interaction gravitationnelle) : $\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0$.

- **Tenseur énergie – impulsion** pour une densité lagrangienne \mathcal{L} sur l'espace-temps :

$$\text{Action} : S = \int d^4x \sqrt{|g|} \mathcal{L}, \text{ où } g = |\det(g^{\mu\nu})| \rightarrow T_{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\delta S}{\delta g^{\mu\nu}}.$$

- **Action de particule libre** (masse m) dans un espace courbé (métrique $g^{\mu\nu}$)

$$S = \int \sqrt{-g} m ds, \text{ où } g = \det(g^{\mu\nu}). \text{ Si } g^{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} \text{ (Minkowski, esp. plat), } S = \int m ds.$$

- **Action de champ scalaire** $\varphi(x)$ dans un espace courbé (métrique $g^{\mu\nu}$)

$$\varphi \text{ étant scalaire, } D_\mu \varphi = \partial_\mu \varphi \text{ et } \mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial^\mu \varphi(x) \partial_\mu \varphi(x) - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2(x)$$

$$\rightarrow S[\varphi] = \int d^4x \sqrt{-g} \left(\frac{1}{2} g^{\mu\nu} \partial_\mu \varphi(x) \partial_\nu \varphi(x) - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2(x) \right).$$

- **Action de champ vectoriel** A_μ dans un espace courbé (métrique $g^{\mu\nu}$)

$$\mathcal{L} = \frac{-1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{1}{2} m^2 A^\mu A_\mu, \text{ où } F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Le tenseur $F^{\mu\nu}$ est antisymétrique, donc $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = D^\mu A^\nu - D^\nu A^\mu$.

$$\rightarrow S[A_\mu] = \int d^4x \sqrt{-g} \left(\frac{-1}{4} g^{\alpha\beta} g^{\gamma\delta} F_{\alpha\gamma} F_{\beta\delta} + \frac{1}{2} m^2 g^{\alpha\beta} A_\alpha A_\beta \right).$$

- **Variation de l'action S** par une perturbation $\delta\varphi$:

$$\delta S = S(\varphi + \delta\varphi, \partial_\mu(\varphi + \delta\varphi)) - S(\varphi, \partial_\mu \varphi).$$

$$\delta S = \int d^4x \left(\mathcal{L}(\varphi + \delta\varphi, \partial_\mu \varphi + \partial_\mu \delta\varphi) - \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi) \right).$$

$$\delta S = \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \delta\varphi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \delta(\partial_\mu \varphi) \right). \text{ Comme } [\partial_\mu, \delta] = 0, \text{ en intégrant par parties,}$$

$$\delta S = \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \delta\varphi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \delta\varphi \right) + \int d^3x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \varphi)} \delta\varphi \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_\Sigma dt d\vec{\sigma} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \varphi)} \delta\varphi.$$

$$\text{Alors, (GO)} \rightarrow \delta S = \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \delta\varphi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \delta\varphi \right).$$

$\forall \delta\varphi, \frac{\delta S}{\delta\varphi} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} \delta\varphi - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi)} \delta\varphi. \rightarrow$ Équation fondamentale du mouvement –
d'Euler-Lagrange pour le champ $\varphi, \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} \delta\varphi - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi)} \delta\varphi = 0.$

- Variation d'action** de densité lagrangienne $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu\varphi(x)\partial^\mu\varphi(x) - \frac{1}{2} m^2\varphi^2(x)$

$S[\varphi] = \int d^4x \mathcal{L} \rightarrow \delta S = \int d^4x \left(\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \delta\varphi(x) \partial_\nu \varphi(x) - m^2 \varphi(x) \delta\varphi(x) \right).$

$\delta S = S(\varphi + \delta\varphi, \partial_\mu(\varphi + \delta\varphi)) - S(\varphi, \partial_\mu\varphi).$

$\delta S = \int d^4x \left(\mathcal{L}(\varphi + \delta\varphi, \partial_\mu\varphi + \partial_\mu\delta\varphi) - \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu\varphi) \right).$

$\rightarrow \delta S = \int d^4x \left(-\partial_\mu \partial^\mu \varphi(x) - m^2 \varphi(x) \right) \delta\varphi(x)$ ($\varphi(x)$: *champ scalaire*).

Équation du mouvement (de Klein-Gordon) : $(\square + m^2) \varphi(x) = 0,$

où $\square = \partial_\mu \partial^\mu = \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \rightarrow$ Moment conjugué à φ : $\pi(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\varphi)} = \partial^0 \varphi = \dot{\varphi}.$

\rightarrow Densité hamiltonienne : $\mathcal{H} = \pi\dot{\varphi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} (\pi^2 + (\nabla\varphi)^2 + m^2\varphi^2), \nabla = (\partial_1, \partial_2, \partial_3)$

- Charge et courant** pour le champ φ (*symétries d'espace-temps de métrique $g^{\mu\nu}$*)

Si la densité lagrangienne \mathcal{L} ne dépend pas explicitement de $x^\mu,$
alors on peut considérer les transformations $\delta x^\mu(x) = \delta x^\mu = \text{cste. } \delta\varphi = 0.$

Le courant $\left(\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\varphi)} \partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}\mathcal{L} \right) \delta x_\nu$ est conservé pour tout $\delta x^\nu.$

Ainsi, le tenseur canonique d'énergie-impulsion du champ, qui s'écrit

$$T^{\mu\nu} = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\varphi)} \partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}\mathcal{L}, \text{ est conservé.}$$

L'impulsion du champ est $\Pi := \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_0\varphi)}.$

$$T^{00} = \Pi\partial^0\varphi - \mathcal{L} = \mathcal{H}, T^{0\nu} = \Pi\partial^\nu\varphi - g^{0\nu}\mathcal{L}.$$

ce qui permet d'interpréter la charge $\int T^{00} d^3x$ comme l'énergie totale du champ.

Ainsi $P^\nu = \int T^{0\nu} d^3x$ qui se transforme comme un quadrivecteur,

peut être identifié au quadrivecteur énergie-impulsion totale du champ.

\rightarrow Conservation du courant par une transformation laissant l'action invariante :

$$j^\mu = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\varphi)} \delta\varphi - T^{\mu\nu} \delta x_\nu.$$

- Cas des lagrangiens indépendants des champs**

C'est le cas pour ceux des champs de jauge avec boson d'interaction de masse nulle. Un terme de masse non nul (dû au boson d'interaction) dans le lagrangien brise en effet l'invariance de jauge et les bosons massifs ne peuvent acquérir leur masse que par un mécanisme de brisure spontanée de symétrie d'un champ auxiliaire scalaire, comme le mécanisme de Higgs.

Exemple pour la densité de Lagrangien de QED dans le vide :

$$\mathcal{L}^Y = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = -\frac{1}{4} \left((\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \right).$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \text{ Par antisymétrie de } F_{\mu\nu}, \mathcal{L}^Y = -\frac{1}{2} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) \partial^\mu A^\nu.$$

Pour les transformations $\delta x^\mu = 0$, $\delta A^\mu(x) = \delta A^\mu = \text{cste}$,

$$j^\mu = \frac{\delta \mathcal{L}^Y}{\delta (\partial_\mu A_\nu)} \delta A_\nu \text{ et donc } \frac{\delta \mathcal{L}^Y}{\delta (\partial_\mu A_\nu)} = -F^{\mu\nu} \text{ se conserve. } \rightarrow \partial^\mu F^{\mu\nu} = 0.$$

C'est la forme covariante des équations de Maxwell dans le vide (MA) et (MG).

On retrouve cette relation avec l'équation du mouvement pour le champ A^μ .

▪ Théorème de Noether (Rappel)

Si le lagrangien d'un système classique est invariant par rapport à une transformation continue, alors il existe une quantité conservée associée à cette transformation. Une quantité conservée correspond à chaque paramètre du groupe de transformation. Ainsi, l'impulsion est la quantité conservée qui est relative à l'invariance par translation et le moment cinétique celle de l'invariance par rotation spatiale. Plus généralement, l'invariance du lagrangien par rapport à un groupe de transformations implique la conservation des générateurs du groupe.

▪ Invariance de Lorentz et structures de tenseurs

Si le lagrangien est invariant sous les transformations de Lorentz, alors pour les transformations (dans le cas des champs scalaires) : $\delta x^\mu = \omega^{\mu\nu} x_\nu$, $\delta \varphi = 0$,

qui laisse invariante l'action, pour tout tenseur infinitésimal $\omega^{\mu\nu}$ antisymétrique, le théorème de Noether implique donc que le courant $\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta (\partial_\mu \varphi)} \partial^\nu \varphi - g^{\mu\nu} \mathcal{L}$.

est conservé, ou encore, puisque $\omega^{\mu\nu}$ est antisymétrique et avec la définition du tenseur d'énergie-impulsion que $(T^{\mu\nu} x^\alpha - T^{\mu\alpha} x^\nu) \omega^{\nu\alpha}$ est conservé, pour tout $\omega^{\nu\alpha}$.

D'où la conservation du tenseur de moment cinétique : $J^{\mu,\nu\alpha} = x^\nu T^{\mu\alpha} - x^\alpha T^{\mu\nu}$.

La charge correspondante est $J^{\nu\alpha} = \int d^3x J^{0,\nu\alpha} = \int d^3x (x^\nu T^{0\alpha} - x^\alpha T^{0\nu})$.

$\partial_\mu J^{\mu,\nu\alpha} = g_\mu^\nu T^{\mu\alpha} - g_\mu^\alpha T^{\mu\nu}$ et donc le tenseur $T^{\mu\nu}$ est symétrique.

Pour un champ non scalaire, la loi de transformation du champ sous le groupe de Lorentz, $\varphi'(x') = \varphi(x)$, se généralise en $\varphi'_a(x') = S(\Lambda)_{ab} \varphi^b(x)$,

où $S(\Lambda)$: matrice de la représentation du type de champ (spinoriel, vectoriel, ...).

La structure du tenseur moment cinétique obtenu est alors tel que :

$J^{\mu,\nu\alpha} = x^\nu T^{\mu\alpha} - x^\alpha T^{\mu\nu} + \Delta^{\mu\nu\alpha}$, où $\Delta^{\mu\nu\alpha}$ est antisymétrique en ν et α ,

et correspond à la contribution du moment cinétique du spin.

▪ Transformations canoniques - Généralités

Variables canoniques : $\{q_i, p_j\}$, opérateurs associés : $\{Q_i, P_j\}$.

Relations de commutation par crochets de Poisson : $[Q_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$.

Les valeurs associées à deux variables conjuguées (Q_i, P_i) ne peuvent être déterminées simultanément, c'est le principe d'incertitude, $\Delta Q_i \Delta P_i \geq \hbar/2$.

Les transformations $(q_1, \dots, q_r) \rightarrow (Q_1, \dots, Q_r)$. ne modifient pas les équations d'Euler-Lagrange. De même, les transformations ponctuelles $Q_i = Q_i(q, t)$ laissent invariantes les équations du mouvement et d'Hamilton.

Soit (p_i, q_i) : grandeurs canoniquement conjuguées, $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ et $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$.

Transformation canonique. Condition : Q_i et P_i vérifient $\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}$ et $\dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i}$.

Or les équations d'Hamilton découlent du principe variationnel :

$\delta \int (\sum_i p_i dq_i - H dt) = 0$, ainsi : $\delta \int (\sum_i P_i dQ_i - H' dt) = 0$. Alors,

$\sum_i p_i dq_i - H dt = \sum_i P_i dQ_i - H' dt + d\Phi$, où donc :

$d\Phi$ étant une différentielle totale, Φ : fonction génératrice de la transformation, dite canonique. Pour $F(q, Q, t)$, avec une transformation de Legendre,

$d(F + \sum_i P_i Q_i) = \sum_i p_i dq_i + \sum_i Q_i dP_i + (H' - H) dt$.

En posant $\Phi(q, P, t) = F(q, Q, t) + \sum_i P_i Q_i$, on a $p_i = \frac{\partial \Phi}{\partial q_i}$, $Q_i = \frac{\partial \Phi}{\partial P_i}$, $H' = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t}$.

. Pour $\Phi(q, P, t) = \sum_{i=1, \dots, r} P_i Q_i(q, t) \rightarrow$ classe des transformations ponctuelles.

. Pour $H(t) = cste$, $H' = H$. \rightarrow On remplace dans H , p_i, q_i fonctions de P_i, Q_i .

■ Hamiltonien canonique - Généralités

. Hamiltonien canonique $H = q_n p_n - L$.

L'hamiltonien, fonction de q_n, p_n , est déduit du lagrangien par transformée de Legendre. Il n'est donc déterminé que sur la surface des contraintes, étendue arbitrairement à tout l'espace des phases (Σ de dim. M) sous la forme :

$H + b_j(q, p)\Phi_j$, $j \in \llbracket 1, M \rrbracket$. Les variations des coordonnées $(\delta q^n, \delta p_n)$ impliquent :

$$\left(\frac{\partial H}{\partial q^i} + \frac{\partial H}{\partial q^i}\right) \delta q^i + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} - \dot{q}^i\right) \delta p_i = 0.$$

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} + u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial p_i}, \quad \left(\frac{\partial L}{\partial q^i}\right)_{\dot{q}} = -\left(\frac{\partial H}{\partial q^i}\right)_p - u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial q^i}.$$

La première équation permet d'exprimer \dot{q}^n en fonction des $(q, p) \in \Sigma$ et des paramètres supplémentaires u^m , coordonnées de (q_n, \dot{q}_n) sur la surface inverse de p_n . On peut alors définir une nouvelle transformation de Legendre, de l'espace (q, \dot{q}) dans l'espace étendu $\{(q, p, u) / \Phi_j(q, p) = 0\}$ qui est inversible.

On obtient ainsi les équations hamiltoniennes du mouvement,

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} + u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\left(\frac{\partial H}{\partial q^i}\right)_p - u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial q^i}, \quad \Phi_j(p, q) = 0, \text{ pouvant être retrouvées}$$

avec le principe variationnel $\delta \int_{t_1}^{t_2} (\dot{q}^i p_i - H - u^m \Phi_m) = 0$.

Alors, pour toute fonction arbitraire $F(p, q)$ de l'espace des phases,

$$\dot{F} = \{F, H\} + u^j \{F, \Phi_j\}. \text{ Les crochets de Poisson sont } \{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q^i}.$$

■ Formalisme hamiltonien dans l'espace-temps 4D, indices : $0 \leftrightarrow \text{ict}$ et $1, 2, 3 \leftrightarrow \text{spatiales}$

. Champ, impulsion associée au champ $\varphi(x) : \pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \varphi)} \quad (x = (ct, \vec{r}))$

Densité hamiltonienne $\mathcal{H}(\varphi(\mathbf{x}), \partial_i \varphi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})) = \pi(\mathbf{x})\dot{\varphi}(\mathbf{x}) - \mathcal{L}(\varphi(\mathbf{x}), \partial_i \varphi(\mathbf{x}))$

Crochets de Poisson avec des **dérivées fonctionnelles** pour les **fonctionnelles**

$$A(\pi, \varphi), B(\pi, \varphi) : \{A, B\} = \frac{\delta A}{\delta \pi} \frac{\delta B}{\delta \varphi} - \frac{\delta B}{\delta \pi} \frac{\delta A}{\delta \varphi} \rightarrow \{\pi(\text{ict}, \vec{r}_1), \varphi(\text{ict}, \vec{r}_2)\} = \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

et les **équations du mouvement** s'écrivent : $\dot{\pi} = \{\mathcal{H}, \pi\}$ et $\dot{\varphi} = \{\mathcal{H}, \varphi\}$.

. Dans l'espace des **phases** $(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \in T_q M$, **espace tangent** en $\mathbf{q} \in M$ d'une **variété différentielle** M , les **équations de la dynamique** avec des **conditions initiales données** amène à une **unique trajectoire**. L'espace **tangent** n'est pas le seul **espace** (ou **variété**) sur lequel les **équations du mouvement** ont une **forme simple**. Car même si les **équations** sur $T_q M$ donnent une **expression explicite** pour $\dot{\mathbf{q}}_a$, les **équations d'Euler-Lagrange** font intervenir les **dérivées secondes** de $\mathbf{q}(t)$. Mais, un **changement de variables** faisant **passer** de $(\mathbf{q}_a, \dot{\mathbf{q}}_a)$ ($a \in \llbracket 1, n \rrbracket$) à $(\mathbf{q}_a, \mathbf{p}_a)$, où les \mathbf{p}_a **correspondent** aux **moments conjugués**, permet aux **équations du mouvement** d'**expliciter** les **dérivées premières** de ces **nouvelles variables** (\mathbf{p}, \mathbf{q}) , les **variables canoniques**. Cela revient à **effectuer** une **transformée de Legendre** en **définissant** les **moments conjugués**, $\mathbf{p}_a = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_a}$ et le **hamiltonien**, ou la **fonction hamiltonienne**, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \mathbf{p}_a \dot{\mathbf{q}}_a - L(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$. Les **équations d'Euler-Lagrange** correspondent dans la **formulation hamiltonienne** aux **équations canoniques d'Hamilton** et les **solutions physiques** sont les **projections** de $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \in T_q^* M$ sur l'espace des **configurations** $\mathbf{q}(t) \in M$. Comme les **équations d'Euler-Lagrange**, les **équations canoniques d'Hamilton** sont des **équations différentielles du premier ordre**, mais avec **2n nouvelles coordonnées** $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \in T_q^* M$, pouvant être **traitées indépendamment**, avec les **mêmes informations**. C'est le **formalisme canonique**.

- **Équation de Hamilton-Jacobi et fonctions génératrices**

La **nature invariante** de la **relation** entre la **1-forme** $\alpha = \mathbf{p}d\mathbf{q} - Hdt$ et ses **lignes de trajectoire** induit la **possibilité** de l'**écriture** des **équations du mouvement** dans **tout** système de **2n+1 coordonnées** de l'espace **cotangent** $T_q^* M$.

La **méthode d'intégration** des **équations différentielles** de la **dynamique d'Hamilton-Jacobi** utilise des **fonctions génératrices** pour des **transformations canoniques**. Sous une **transformation canonique** de **coordonnées**, la **forme** des **équations du mouvement** est **préservée** selon les **équations d'Hamilton**. Avec une **transformation canonique réduisant** la **fonction hamiltonienne** sous une **forme** telle que les **équations** peuvent être **intégrées**, on peut aussi **intégrer** les **équations canoniques originales**. Cela revient à **déterminer** un **nombre suffisant** de **solutions** à l'**équation de Hamilton-Jacobi** dont la **fonction génératrice** de la **transformation canonique**. Cette **méthode** utilise la **structure** des **coordonnées** de l'espace des **phases** $T_q^* M$. La **fonction action** satisfait l'**équation non linéaire différentielle** du **premier ordre**, **équation de Hamilton-Jacobi** pour la **fonction génératrice action** S :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) \text{ et } \mathbf{p} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}.$$

- **Champs vectoriels hamiltoniens** sur une **structure symplectique**

Une **structure symplectique** sur **M**, variété différentielle de **dimension 2n**, est munie d'une **2-forme différentielle** ω , fermée (close), non-dégénérée telle que :

$\forall V, W \in T_q M, d\omega = 0. \forall V \neq 0, \exists W / \omega(V, W) \neq 0. T_q M : \text{espace tangent en } q \text{ à } M. (M^{2n}, \omega)$ est une **variété symplectique**.

Les **équations canoniques** (différentielles du **1^{er} ordre**) d'**Hamilton** se réécrivent :

$$\begin{cases} \dot{\xi}^i = \frac{\partial H}{\partial \xi^{i+n}}, & i = 1, \dots, n \\ \dot{\xi}^i = -\frac{\partial H}{\partial \xi^{i-n}}, & i = n+1, \dots, 2n \end{cases} . \text{ Soit : } \dot{\xi}^i = \omega^{ij} \partial_j H, \omega_{ij} \dot{\xi}^i = \partial_j H, \text{ où :}$$

$$\Omega = (\omega^{ij})_{\substack{i \in [1, 2n] \\ j \in [1, 2n]}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_n & -\mathbb{I}_n \\ \mathbb{I}_n & \mathbf{0}_n \end{pmatrix} : \text{matrice symplectique.}$$

L'espace $T_q^* M$ possède naturellement une telle structure. Sur une variété symplectique, comme une variété riemannienne, il existe un isomorphisme naturel entre champs de vecteurs et 1-formes. Le champ de vecteurs hamiltonien décrit un difféomorphisme hamiltonien sur la variété symplectique. Le théorème de Liouville implique que ce flot hamiltonien préserve la forme volume.

Un champ vectoriel sur une variété détermine un groupe de difféomorphismes à un paramètre. Un tel groupe pour un champ vectoriel hamiltonien sur une variété symplectique préserve la structure symplectique de l'espace des phases.

Les champs vectoriels hamiltoniens sur une variété symplectique forment une algèbre de Lie de crochets de Poisson comme opération entre éléments.

L'espace cotangent $T_q^* M$ est une variété de transport car les équations canoniques d'Hamilton sont différentielles du premier ordre : les trajectoires ne se croisent pas sur $T_q^* M$. Elles définissent un champ de vecteurs sur $T_q^* M$ dont les composantes sont les 2n fonctions $\omega^{ij} \partial_j H$. $\xi^i(t)$ représentent les courbes intégrales de ce champ de vecteurs : le champ de vecteurs dynamique. Ainsi, de même que les équations d'Euler-Lagrange forment un champ de vecteurs sur $T_q M$, les équations canoniques d'Hamilton établissent un champ de vecteurs sur $T_q^* M$.

L'évolution d'une fonction dynamique $f(q, p, t)$ le long d'une trajectoire peut être déterminée sans résoudre les équations du mouvement, car la dérivée temporelle se déduit de la dérivée de Lie le long du champ de vecteurs dynamique :

$$\mathcal{L}_X f \doteq \frac{df}{dt} = (\partial_i f) \dot{\xi}^i + \partial_t f = (\partial_i f) \omega^{ij} \partial_j H + \partial_t f = \{f, H\} + \partial_t f, \text{ où :}$$

les crochets de Poisson de fonctions dynamiques f, g sont définis par :

$$\forall f, g \in \mathcal{F}(T^* M), \{f, g\} \doteq (\partial_i f) \omega^{ij} \partial_j g = \frac{\partial f}{\partial q^a} \frac{\partial g}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a} \frac{\partial g}{\partial q^a} .$$

$$\dot{\xi}^i = \{\xi^i, H\} \text{ et } \{\xi^i, f\} = \omega^{ij} \partial_j f, \text{ soit : } \{q^a, f\} = \frac{\partial f}{\partial p_a} \text{ et } \{p_a, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q^a}$$

$$\{\xi^i, \xi^j\} = \omega^{ij} : \{q^a, p_b\} = -\{p_b, q^a\} = \delta_b^a, \{q^a, q^b\} = \{p_a, p_b\} = 0.$$

Une variété symplectique munie d'un tenseur métrique compatible avec la forme symplectique est une « variété kählérienne ».

- **Représentations (Rappels)**

- . de **Schrödinger**

Contrairement aux opérateurs, les vecteurs évoluent temporellement selon l'équation de Schrödinger, avec l'opérateur d'évolution : $|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$.

- . de **Heisenberg**

Contrairement à la fonction d'onde, les opérateurs évoluent temporellement. On peut définir un vecteur d'état indépendant du temps avec l'opérateur d'évolution.

$|\psi_H(t)\rangle = \hat{U}^+(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle$, l'évolution temporelle des opérateurs si l'observable ne dépend pas explicitement du temps est telle que : $\hat{O}_H(t) = \hat{U}^+(t, t_0)\hat{O}_S\hat{U}(t, t_0)$.

$i\hbar \frac{d\hat{O}_H}{dt} = [\hat{O}_H(t), \hat{H}_H(t)]$: un invariant est ainsi un opérateur qui commute avec \hat{H}_H .

- . d'interaction

Opérateurs et états dépendent du temps et le hamiltonien est la somme d'un terme libre et d'un autre d'interaction : $H = H_0 + V$. Pour un vecteur d'état et pour

un opérateur : $|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^+(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle$, $\hat{O}_I(t) = \hat{U}_0^+(t, t_0)\hat{O}_S\hat{U}_0(t, t_0)$.

Un état n'évolue que selon l'hamiltonien d'interaction en représentation alors que l'évolution temporelle des opérateurs ne dépend que du hamiltonien libre :

$$i\hbar \frac{d|\psi_I\rangle}{dt} = V_I|\psi_I\rangle(t), \quad i\hbar \frac{d\hat{O}_I}{dt} = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_{0I}(t)](t).$$

$$\langle \psi_{I1} | \hat{O}_I | \psi_{I2} \rangle = \langle \psi_{H1} | \hat{O}_H | \psi_{H2} \rangle = \langle \psi_{S1} | \hat{O}_S | \psi_{S2} \rangle.$$

- **Passage du formalisme hamiltonien à une description quantique**

Il s'effectue des quantités définies sur l'espace des phases en opérateurs agissant dans l'espace des états et le crochet de Poisson de deux quantités proportionnelles à un commutateur des deux opérateurs correspondants. Aux variables canoniques p_i, q_i de la mécanique correspondent ainsi des opérateurs P_i, Q_i obéissant aux relations de commutations : $[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$. (Cf. principe d'incertitude)

- **Exemple de passage du formalisme hamiltonien à une description quantique**

Équation de Klein-Gordon de densité lagrangienne $\mathcal{L} = -\frac{1}{2} (\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \varphi \partial_\nu \varphi + m^2 \varphi^2)$

Pour un champ scalaire $\varphi(x^\mu)$, ce formalisme est analogue à celui de l'oscillateur harmonique dont les variables ne sont plus (en 1D) x, t , mais des champs $\varphi(x, t)$ et

$\pi(x, t) = \dot{\varphi}$ à valeur sur l'espace. $\varphi(x_\mu)$, non fonction d'onde, en représentation de Schrödinger, on utilise une fonctionnelle d'onde complexe $\Psi[\varphi(x_\mu)]$ qui définit l'amplitude de probabilité d'obtenir le champ avec cette configuration.

Dans la représentation de Heisenberg on considère φ comme opérateur quantique. Une solution de l'équation de Klein-Gordon est l'onde plane :

Une solution de l'équation de Klein-Gordon est l'onde plane :

$\varphi(x_\mu) = \varphi_0 \cdot \exp i(k_\mu x_\mu)$ de fréquence vérifiant $\omega^2 = m^2 \pm k^2$. Les solutions possibles pour les oscillations, dépendent du nombre d'onde $\pm k$ et du signe de la racine carrée. On peut expliciter des solutions générales avec une base complète

et orthonormale (Cf. *produit scalaire dans l'espace des solutions de l'équation de Klein-Gordon, défini en intégrale sur une hypersurface*).

- **Opérateurs de création et d'annihilation**

Les **opérateurs de création** sont des **opérateurs agissant** sur l'espace de Fock qui **changent un état à n particules en un autre à n + 1 particules**. Les **opérateurs d'annihilation** sont des **opérateurs agissant** sur l'espace de Fock qui **changent un état à n particules en un autre à n - 1 particules si n ≥ 1**.

Opérateurs de création, $\Psi^\dagger : V_n \rightarrow V_{n+1}$, $\Psi^\dagger(x)|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle = |x, x_1, x_2, \dots, x_n\rangle$.

Son **adjoint, Ψ** , est l'**opérateur d'annihilation**, tel que **$\Psi : V_n \rightarrow V_{n-1}$** .

Pour $\langle y_1, y_2, \dots, y_{n-1} | \Psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = \langle x, y_1, y_2, \dots, y_n | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle$

$\langle y_1, y_2, \dots, y_{n-1} | \Psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = \langle y_1, y_2, \dots, y_n, x | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle$

$= \sum_{p \in S_n} \delta(y_1 - x_{p(1)}) \dots \delta(y_{n-1} - x_{p(n-1)}) \delta(x - x_{p(n)})$

$\langle y_1, y_2, \dots, y_{n-1} | \Psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = \sum_{i=1}^n \delta(x - x_i) \langle y_1, \dots, y_{n-1} | x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n \rangle$

$|x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n\rangle$ est $|x_1, \dots, x_n\rangle$ sans x_i en $i^{\text{ème}}$ position.

$\Psi^\dagger(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = |x, x_1, x_2, \dots, x_n \rangle$.

D'où les **relations de commutation** : **$[\Psi(x), \Psi(y)] = 0$, $[\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] = \delta(x - y)$.**

Relations d'anticommuation,

Pour $\langle y_1, y_2, \dots, y_{n-1} | \Psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = (-1)^{n+1} \langle y_1, y_2, \dots, y_n, x | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle$

$\langle y_1, y_2, \dots, y_{n-1} | \Psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = (-1)^{n+1} \sum_{p \in S_n} \varepsilon_p \delta(y_1 - x_{p(1)}) \dots \delta(y_{n-1} - x_{p(n-1)}) \delta(x - x_{p(n)}) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+1} \delta(x - x_i) \langle y_1, \dots, y_{n-1} | x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n \rangle$.

$|x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n\rangle$ est $|x_1, \dots, x_n\rangle$ sans x_i en $i^{\text{ème}}$ position.

$\Psi^\dagger(x) | x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = |x, x_1, x_2, \dots, x_n \rangle$.

D'où les **relations d'anticommuation** : **$\{\Psi(x), \Psi(y)\} = 0$, $\{\Psi(x), \Psi^\dagger(y)\} = \delta(x - y)$.**

Pour les **bosons**, l'**opérateur de création, \hat{a}_i^\dagger** , **généralant une particule dans l'état i** est tel que :

$\hat{a}_i^\dagger | N_1, \dots, N_i, \dots \rangle = \sqrt{N_i + 1} | N_1, \dots, N_i + 1, \dots \rangle$. Par **commutation**

$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] = 0$, on **obtient** alors les **états normalisés** de l'espace de Fock :

$|N_1, N_2, \dots \rangle = \prod_i (1/\sqrt{N_i!}) (\hat{a}_i^\dagger)^{N_i} |0\rangle$.

Pour les **fermions**, le **principe d'exclusion de Pauli** rend **impossible la création**

(**opérateur** : \hat{c}_i^\dagger) de **deux fermions** dans le **même état**, **$(\hat{c}_i^\dagger)^2 = 0$, $\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i^\dagger\} = 0$** et

$\hat{c}_i^\dagger | N_1, \dots, 0, \dots \rangle = |N_1, \dots, 1, \dots \rangle$ (**0 et 1 en $i^{\text{ème}}$ position**), on **obtient** alors les **états**

normalisés de l'espace de Fock : $|N_1, N_2, \dots \rangle = \prod_k (\hat{c}_k^\dagger)^{N_k} |0\rangle$.

L'**anticommuation implique** le **choix d'un ordre d'action** des **opérateurs de création** (dans les **produits**). Un **opérateur de création** est **conjugué hermitique** d'un **opérateur d'annihilation** et **inversement**.

- **Théorème de connexion spin-statistique**

Il stipule dans un espace 3D que les particules de spin demi-entier obéissent à la statistique de Fermi-Dirac, celles de spin entier, à celle de Bose-Einstein (Cf. PC3). Le spin entier y correspond à une fonction d'onde symétrique et le spin demi-entier à une fonction d'onde antisymétrique. Le spin représente un nombre quantique associé à l'invariance de Lorentz et définit le type d'expression du champ (scalaire, vectoriel, spinoriel, ...). La quantification de chaque champ comprend les opérateurs de création et d'annihilation, ainsi que les opérateurs de champ. La quantification d'un champ de spin entier nécessite des relations de commutation entre opérateurs, celle d'un champ de spin demi-entier des relations d'anticommutation. Ainsi, la différence du nombre de particules et d'antiparticules se conserve et l'énergie du système est toujours positive. Le spin (relativiste) et la symétrie de la fonction d'onde (d'un postulat de mécanique quantique) doivent correspondre dans le cadre d'une théorie unificatrice : la TQC.

- **Quantifications**

. Une transformation de Fourier, $\phi(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{\phi}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{k}}) e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}}}$ permet de réécrire l'équation de Klein-Gordon $(\square + m^2)\phi(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = 0$ par :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{t}^2} + |\vec{\mathbf{k}}|^2 + m^2 \right) \tilde{\phi}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{k}}) = 0. \text{ On note } \omega_{\vec{\mathbf{k}}} = \sqrt{|\vec{\mathbf{k}}|^2 + m^2}.$$

Cela correspond à un oscillateur harmonique de fréquence $\omega_{\vec{\mathbf{k}}}$.

Pour quantifier le champ scalaire, on définit le moment conjugué, $\pi(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})$ de $\phi(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})$ avec $\pi(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})}$.

. **Quantification** avec **champ scalaire libre**, $\mathcal{L} = (1/2)\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - (m^2/2)\phi^2$.

Équation de Klein Gordon : $(\square + m^2)\phi(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = 0$, $\pi(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}}) = \dot{\phi}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})$ et la densité hamiltonienne, $\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} = (1/2)(\pi^2 + (\nabla \phi)^2 + m^2 \phi^2)$, $H = \int d^3\mathbf{x} \mathcal{H}$.

On définit des fonctions a par les coefficients de Fourier pour une transformation de Fourier des coordonnées spatiales :

Résolution de l'équation de Klein-Gordon $\left(k = (k^0, \vec{\mathbf{k}}), k^0 = \omega_{\vec{\mathbf{k}}} = \sqrt{|\vec{\mathbf{k}}|^2 + m^2} \right)$:

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{\mathbf{k}}}}} (\hat{a}(\vec{\mathbf{k}}) e^{-ikx} + \hat{a}^\dagger(\vec{\mathbf{k}}) e^{ikx})$$

\hat{a} : opérateur d'annihilation, \hat{a}^\dagger : opérateur de création de particules.

On a $\hat{a}(\vec{\mathbf{k}}) = i \int d^3\mathbf{x} e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}}} \partial_0 \leftrightarrow \phi(\mathbf{x})$, où $f \partial_0 \leftrightarrow g = f \partial_0 g - g \partial_0 f$.

Quantification : champs \rightarrow opérateurs, relations canoniques de commutation à temps égaux. $[\hat{a}(\vec{\mathbf{k}}), \hat{a}^\dagger(\vec{\mathbf{k}}')] = \delta(\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}}')$.

Opérateur nombre de particules : $\hat{N}_a = \int d^3\mathbf{k} \hat{a}^\dagger(\vec{\mathbf{k}}) \hat{a}(\vec{\mathbf{k}})$.

Opérateur densité d'énergie : $\hat{H} = \int d^3\mathbf{k} \hbar \omega_{\vec{\mathbf{k}}} (\hat{a}^\dagger(\vec{\mathbf{k}}) \hat{a}(\vec{\mathbf{k}}))$.

Opérateur moment : $\hat{P} = \int d^3k \hbar \vec{k} \left(\hat{a}^\dagger(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}) \right)$.

$[\hat{\Phi}(\vec{x}), \hat{\pi}(\vec{y})] = [\hat{\Phi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\pi}^\dagger(\vec{y})] = \delta(\vec{x} - \vec{y})$, où $\hat{\pi}(\vec{x}) = \partial_0 \hat{\Phi}(\vec{x})$.

$[\hat{\Phi}(\vec{x}), \hat{\Phi}^\dagger(\vec{y})] = i\Delta(\vec{x} - \vec{y})$ et si $x^0 = y^0$, $[\hat{\Phi}(\vec{x}), \hat{\Phi}^\dagger(\vec{y})] = [\hat{\Phi}(\vec{x}), \hat{\Phi}(\vec{y})] = 0$.

$\Delta(\vec{x} - \vec{y})$ est un **propagateur**.

. **Quantification** avec **champ scalaire** et **interaction**

$\mathcal{L} = (1/2)\partial_\mu \partial^\mu \Phi - (m^2/2)\Phi^2 - V_{\text{int}}(\Phi)$. On ne peut en général résoudre.

En rapport au cas libre, définissant des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger tels que :

$\hat{a}(\vec{k}) = i \int d^3x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \partial_0 \Phi(\vec{x})$, ils ne seront plus indépendants du temps.

De plus, $|0\rangle$ devient combinaison linéaire de tous les états du spectre et n'est plus un état propre d'impulsion correspondant à \vec{k} .

Évolution temporelle des opérateurs selon l'équation d'Heisenberg :

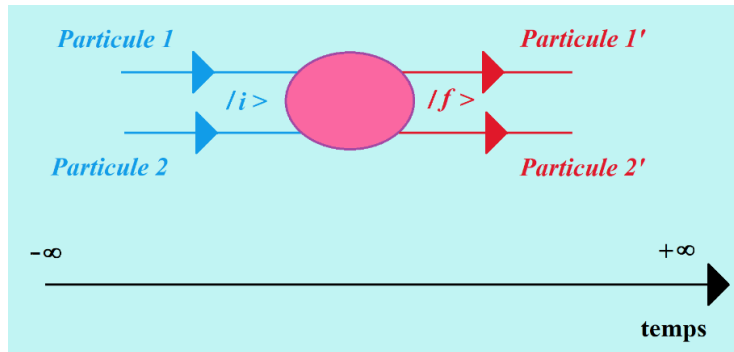
Par l'équation de Schrödinger, $\hat{\Phi}(\vec{x}, t) = e^{itH} \hat{\Phi}(\vec{x}, 0) e^{-itH}$.

Généralisation relativiste : $\hat{\Phi}(x) = e^{iP^\mu x} \hat{\Phi}(0) e^{-iP^\mu x}$, $P^\mu = T^{0\mu}$.

$\langle 0 | \hat{\Phi}(x) | 0 \rangle = 0$, $\langle p | \hat{\Phi}(x) | 0 \rangle = e^{ipx}$,

$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \hat{a}^\dagger(\vec{k}, t) | 0 \rangle$ s'assimile à un état normalisé à une particule.

On effectue par exemple une **réduction LSZ** (méthode de calcul des éléments de la matrice des amplitudes de diffusion S par les fonctions de corrélation T -ordonnées d'une TQC, Cf. fiches TQC3, 4) pour la diffusion $2 \rightarrow 2$:



Particules à $t \rightarrow \pm\infty$: paquets d'onde semblables à des champs libres et entre, soumises aux interactions. L'amplitude de probabilité quantique $\langle f | i \rangle$ pour une transition de l'état initial $|i\rangle$ à l'état final $|f\rangle$. Soient des paquets d'onde de largeur finie, par exemple, gaussien localisé autour de \vec{k}_1 dans l'espace des impulsions :

$$a_1^\dagger(t) = \int d^3k f_1(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}, t), \quad f_1(\vec{k}) \propto \exp\left(-|\vec{k} - \vec{k}_1|^2 / 2\sigma^2\right),$$

$$|i\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} a_1^\dagger(t) a_2^\dagger(t) |0\rangle, \quad |f\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} a_{1f}^\dagger(t) a_{2f}^\dagger(t) |0\rangle.$$

$$a_1^\dagger(+\infty) - a_1^\dagger(-\infty) = -i \int d^3k f_1(\vec{k}) \left(\lim_{x^0 \rightarrow +\infty} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \overrightarrow{\partial}_0 \Phi(x) - \lim_{x^0 \rightarrow -\infty} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \overrightarrow{\partial}_0 \Phi(x) \right)$$

$$= -i \int d^3k f_1(\vec{k}) \int d^4x \partial_0 \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \overrightarrow{\partial}_0 \Phi(x) \right).$$

$$= -i \int d^3 \mathbf{k} f_1(\vec{\mathbf{k}}) \int d^4 \mathbf{x} e^{-i \mathbf{k} \mathbf{x}} \left(-i \mathbf{k}^0 \partial_0 + \partial_0^2 + \mathbf{k}^0{}^2 + i \mathbf{k}^0 \partial_0 \right) \phi(\mathbf{x}).$$

$$\text{Donc, } \mathbf{a}_1^\dagger(+\infty) - \mathbf{a}_1^\dagger(-\infty) = -i \int d^3 \mathbf{k} f_1(\vec{\mathbf{k}}) \int d^4 \mathbf{x} e^{-i \mathbf{k} \mathbf{x}} (\square + \mathbf{m}^2) \phi(\mathbf{x}).$$

$$\text{Et, } \mathbf{a}_1(+\infty) - \mathbf{a}_1(-\infty) = i \int d^3 \mathbf{k} f_1(\vec{\mathbf{k}}) \int d^4 \mathbf{x} e^{i \mathbf{k} \mathbf{x}} (\square + \mathbf{m}^2) \phi(\mathbf{x}).$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle = \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_{1f(+\infty)} \mathbf{a}_{2f(+\infty)} \mathbf{a}_1^\dagger(-\infty) \mathbf{a}_2^\dagger(-\infty) | \mathbf{0} \rangle.$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle = \langle \mathbf{0} | \mathbf{T} \mathbf{a}_{1f(+\infty)} \mathbf{a}_{2f(+\infty)} \mathbf{a}_1^\dagger(-\infty) \mathbf{a}_2^\dagger(-\infty) | \mathbf{0} \rangle.$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle = \left\langle \mathbf{0} \left| \left(\mathbf{T} (\mathbf{a}_{1f(+\infty)} - \mathbf{a}_{1f(-\infty)}) (\mathbf{a}_{2f(+\infty)} - \mathbf{a}_{2f(-\infty)}) \right) \left((\mathbf{a}_1^\dagger(-\infty) - \mathbf{a}_1^\dagger(+\infty)) (\mathbf{a}_2^\dagger(-\infty) - \mathbf{a}_2^\dagger(+\infty)) \right) \right| \mathbf{0} \right\rangle.$$

À la limite des impulsions pour lesquelles les largeurs des paquets d'onde tendent vers zéro, $f_1(\vec{\mathbf{k}}) \rightarrow \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}}_1)$,

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle = i^4 \int d^4 \mathbf{x}_1 d^4 \mathbf{x}_2 d^4 \mathbf{x}_{1f} d^4 \mathbf{x}_{2f} e^{-i(\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2 - \mathbf{k}_{1f} \mathbf{x}_{1f} - \mathbf{k}_{2f} \mathbf{x}_{2f})} (\square_1 + \mathbf{m}^2)$$

$$(\square_2 + \mathbf{m}^2) (\square_{1f} + \mathbf{m}^2) (\square_{2f} + \mathbf{m}^2) \langle \mathbf{0} | \mathbf{T} \phi(\mathbf{x}_1) \phi(\mathbf{x}_2) \phi(\mathbf{x}_{1f}) \phi(\mathbf{x}_{2f}) | \mathbf{0} \rangle.$$

Soit, après transformation de Fourier :

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle = (-i)^4 (\mathbf{k}_1^2 - \mathbf{m}^2) (\mathbf{k}_2^2 - \mathbf{m}^2) (\mathbf{k}_{1f}^2 - \mathbf{m}^2) (\mathbf{k}_{2f}^2 - \mathbf{m}^2)$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{k}_{2f}), \text{ où : } \mathbf{G}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{k}_{2f}) =$$

$$\int d^4 \mathbf{x}_1 d^4 \mathbf{x}_2 d^4 \mathbf{x}_{1f} d^4 \mathbf{x}_{2f} e^{-i(\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2 - \mathbf{k}_{1f} \mathbf{x}_{1f} - \mathbf{k}_{2f} \mathbf{x}_{2f})} \langle \mathbf{0} | \mathbf{T} \phi(\mathbf{x}_1) \phi(\mathbf{x}_2) \phi(\mathbf{x}_{1f}) \phi(\mathbf{x}_{2f}) | \mathbf{0} \rangle$$

. Normalisation de l'intensité du champ

Le facteur de normalisation Z dans la définition des champs d'entrée (« in ») et de sortie (« ret ») se justifie avec la relation entre le vide et un seul état de particule de 4-moment \mathbf{p} : $\langle \mathbf{0} | \varphi(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \sqrt{Z} \langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle + \int d^4 \mathbf{y} \Delta_{ret}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \mathbf{0} | \mathbf{j}(\mathbf{y}) | \mathbf{p} \rangle$,

où φ : champ scalaire d'interaction libre avec une transformée de Lorentz telle que $\varphi(\mathbf{x}) = e^{i \mathbf{p} \mathbf{x}} \varphi(\mathbf{0}) e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}}$. On obtient avec Δ_{ret} , opérateur fonction de Green :

$$e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}} \langle \mathbf{0} | \varphi(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \sqrt{Z} e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}} \langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle + \int d^4 \mathbf{y} \Delta_{ret}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \mathbf{0} | \mathbf{j}(\mathbf{y}) | \mathbf{p} \rangle.$$

En appliquant l'équation de Klein-Gordon des deux côtés, comme \mathbf{p} est on-shell :

$$\mathbf{0} = \mathbf{0} + \int d^4 \mathbf{y} \delta^4(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \mathbf{0} | \mathbf{j}(\mathbf{y}) | \mathbf{p} \rangle : \langle \mathbf{0} | \mathbf{j}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{0} \rightarrow \langle \mathbf{0} | \varphi(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \sqrt{Z} \langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle$$

Contrairement au champ d'interaction φ , φ_{in} étant libre, ne peut connecter que des états à une particule avec le vide, d'où la nécessité du facteur de normalisation entre les deux. En introduisant les opérateurs de création et d'annihilation,

$$\langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{q} / (2\pi)^{3/2} (2\omega_q)^{1/2} e^{-i \mathbf{q} \mathbf{x}} \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_{in}(\mathbf{q}) | \mathbf{p} \rangle$$

$$\langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{q} / (2\pi)^{3/2} e^{-i \mathbf{q} \mathbf{x}} \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_{in}(\mathbf{q}) \mathbf{a}_{in}^\dagger(\mathbf{p}) | \mathbf{0} \rangle.$$

Avec les relations de commutation entre \mathbf{a}_{in} et \mathbf{a}_{in}^\dagger ,

$$\langle \mathbf{0} | \varphi_{in}(\mathbf{x}) | \mathbf{p} \rangle = e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}} / (2\pi)^{3/2}, \text{ puis } \langle \mathbf{0} | \varphi(\mathbf{0}) | \mathbf{p} \rangle = \sqrt{Z / 8\pi^3}.$$

→ En sachant calculer $\langle \mathbf{0} | \varphi(\mathbf{0}) | \mathbf{p} \rangle$, on peut déterminer Z .

. **Quantification** avec **champ spinoriel** de **spin 1/2**

Elle s'effectue de même avec la résolution de l'équation de Dirac. Un champ spinoriel se définit par sa masse et son hélicité. Pour un fermion massif de spin 1/2, il y a 2 états d'hélicité. Après quantification, le champ spinoriel libre, la solution de l'équation de Dirac, est, en termes d'opérateurs de création $a_i(\mathbf{k})$ et $b_i(\mathbf{k})$

($i \leftrightarrow$ hélicité, composante du spin) :

$$\Psi(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} \sum_{i=1}^2 (u_i(\mathbf{k}) a_i(\mathbf{k}) e^{-ikx} + v_i(\mathbf{k}) b_i^\dagger(\mathbf{k}) e^{ikx}).$$

$$\bar{\Psi}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} \sum_{i=1}^2 (\bar{u}_i(\mathbf{k}) a_i^\dagger(\mathbf{k}) e^{ikx} + \bar{v}_i(\mathbf{k}) b_i(\mathbf{k}) e^{-ikx}).$$

où $u_i(\mathbf{k}), v_i(\mathbf{k})$: spineurs de base, $a_i(\mathbf{k})$: opérateurs de création et d'annihilation pour une particule ou une antiparticule $b_i(\mathbf{k})$ d'impulsion \mathbf{k} et d'hélicité i . Pour obtenir une énergie positive, on impose des relations d'anticommutation au lieu des crochets de Poisson : $\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = \{b_i^\dagger, b_j^\dagger\} = \{b_i, b_j\} = 0$,

$$\{a_i(\mathbf{k}), a_j^\dagger(\mathbf{k}')\} = \{b_i(\mathbf{k}), b_j^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{ij} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

▪ **Transformation de Bogolioubov**

Isomorphisme de l'algèbre canonique des relations de commutation ou de l'algèbre canonique des relations d'anticommutation qui génère une auto-équivalence sur les représentations respectives, elle sert à diagonaliser les hamiltoniens, ce qui donne les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger correspondante.

Soit la relation de commutation canonique pour les opérateurs de création et d'annihilation bosoniques dans la base harmonique : $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Avec $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{u}\hat{\mathbf{a}} + \mathbf{v}\hat{\mathbf{a}}^\dagger$, on obtient $[\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{b}}^\dagger] = (|\mathbf{u}|^2 - |\mathbf{v}|^2) [\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] = (|\mathbf{u}|^2 - |\mathbf{v}|^2)$.

La condition pour une transformation canonique est donc $|\mathbf{u}|^2 - |\mathbf{v}|^2 = 1$.

On peut paramétrer $\mathbf{u} = e^{i\alpha_1} \mathbf{c}h(r)$, $\mathbf{v} = e^{i\alpha_2} \mathbf{c}h(r)$.

Cela s'assimile à une transformation symplectique linéaire de l'espace des phases. En comparant à la décomposition de Bloch-Messiah, les deux angles α_1, α_2 correspondent aux transformations symplectiques orthogonales (rotations) et le facteur de compression r à la transformation diagonale.

Pour les modes fermioniques, les relations d'anticommutation sont :

$$\{\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}\} = 0, \{\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger\} = 1.$$

La transformation de Bogolioubov est alors contrainte par $|\mathbf{u}|^2 + |\mathbf{v}|^2 = 1, \mathbf{u}\mathbf{v} = 0$. La seule possibilité non triviale est $\mathbf{u} = 0, |\mathbf{v}| = 1$ correspondant à l'échange particule-antiparticule avec un déphasage potentiel. Ainsi, pour une même particule, la transformation ne peut s'envisager que pour un fermion de Dirac, où particule et antiparticule sont distinctes, ou pour des systèmes multi-fermioniques. Les transformations de Bogolioubov, recombinaison linéaire d'opérateurs, s'écrivent en termes de transformations matricielles.

Transformation de la paire d'annihilateurs $(\mathbf{a}, \mathbf{b}), \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}$,

Transformation de la paire de créateurs (a^\dagger, b^\dagger) , $\begin{pmatrix} \alpha^\dagger \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = U^* \begin{pmatrix} a^\dagger \\ b^\dagger \end{pmatrix}$.

Les relations de commutation nécessitent :

. Pour les opérateurs de boson, $U = \begin{pmatrix} \mathbf{u} & \mathbf{v} \\ \mathbf{v}^* & \mathbf{u}^* \end{pmatrix}$, avec $|\mathbf{u}|^2 - |\mathbf{v}|^2 = 1$.

. Pour les opérateurs de fermion $U = \begin{pmatrix} \mathbf{u} & \mathbf{v} \\ -\mathbf{v}^* & \mathbf{u}^* \end{pmatrix}$, avec $|\mathbf{u}|^2 + |\mathbf{v}|^2 = 1$.

Alors, $U\Gamma_\pm U^\dagger = \Gamma_\pm = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$, Γ_+ s'applique aux fermions, Γ_- aux bosons.

La transformation de Bogoliubov permet ainsi de diagonaliser un hamiltonien quadratique $\hat{H} = (a^\dagger \ b^\dagger)H\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. $\hat{H} = (\alpha^\dagger \ \beta^\dagger)\Gamma_\pm U(\Gamma_\pm H)U^{-1}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$.

$\Gamma_\pm U(\Gamma_\pm H)U^{-1}$ est diagonale si U diagonalise $\Gamma_\pm H$.

▪ Écoulements de symétrie

Dans la formulation hamiltonienne, une opération de symétrie continue consiste en un écoulement dans l'espace des phases selon le paramètre de la transformation.

L'évolution temporelle est un cas particulier d'écoulement, pour lequel le hamiltonien H est le générateur. Pour une opération de symétrie générale, on considère le générateur Q en fonction duquel les variations de q et de p sous une transformation infinitésimale sont $\delta q = \varepsilon$. Ces équations sont l'équivalent des équations du mouvement de Hamilton pour des opérations de symétrie autres que l'évolution temporelle. Ainsi, la variation d'une fonction $F(q, p)$ par rapport à une transformation infinitésimale est $\delta F = \varepsilon[F, Q]$.

Si le hamiltonien H est invariant par rapport à la transformation, $[H, Q] = 0$. Alors, $Q(q, p)$ est aussi constante dans le temps. Cette fonction comme la variation δq s'identifient avec celles exprimées par le théorème de Noether. La quantification canonique produit ces relations en mécanique quantique. La variation d'un opérateur F lors d'une transformation infinitésimale est $i\hbar\delta F = \varepsilon[F, Q]$, où le crochet de Poisson est remplacé par un commutateur. Le générateur de la symétrie est naturellement conservé, puisqu'il commute avec le hamiltonien. Le théorème de Noether en mécanique classique, est efficient en mécanique quantique, car les quantités conservées sont les mêmes.

Un système intégrable peut être décrit en mécanique quantique par un E.C.O.C. (« Ensemble complet d'observables qui commutent » et dont il existe une unique base orthonormée de vecteurs propres communs) comportant N opérateurs et les états sont ainsi identifiés à N nombres quantiques. Dans un système non intégrable, il y a moins de nombres quantiques, mais la dégénérescence est réduite d'autant. Les coordonnées dépendantes car liées par des équations de contraintes, les équations du mouvement ne le sont pas. On introduit alors des coordonnées généralisées pour les contraintes holonomes.

Les forces de contraintes sont elles-mêmes des inconnues et obtenues selon la solution cherchée. On doit décrire la mécanique afin que les forces de contraintes disparaissent et ne plus considérer que les forces appliquées connues. C'est le cas pour des contraintes internes si le travail des forces internes s'annule.

- **Contraintes**

Ce sont des **relations** entre **différentes coordonnées** du système.

Une **contrainte** est dite **holonome** si l'on peut **établir** une **relation** entre les **coordonnées**, et éventuellement le **temps**, telle que : $f(x_1, x_2, \dots, x_n, t) = 0$.

Les **contraintes non holonomes** peuvent être de **deux types** : **bilatérales**, avec **égalité** ou bien **unilatérales**, avec une **inégalité**. Une **contrainte non en dépendance explicite** du **temps**, $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, est « **scéléronome** » sinon elle est « **rhéonome** ».

- **Principe classique** des **moindres contraintes** de **Gauss**

Il permet de **traiter** les **contraintes non holonomes**, par l'**introduction** de **contraintes modifiant** le **moins possible** le **mouvement** d'un **système initialement libre**.

Exemple : système de **n points** (*indices i*) de **masse m_i** , soumis à des **contraintes**.

On pose \ddot{q}^i : **composante** de l'**accélération réelle** (*sous contraintes*) et F_i/m_μ : **composante** de l'**accélération** qu'aurait le **point μ** de **masse m_μ** sans **contraintes**.

Le **principe stipule** que le **mouvement réel** correspond à la **minimalisation** de la **fonction** $\sum_{i=1}^{3n} m_\mu (\ddot{q}^i - F_i/m_\mu)^2$.

- **Études liées** aux **contraintes**

En **mécanique hamiltonienne**, une **contrainte primaire** est une **relation** entre les **coordonnées** et les **impulsions vérifiée sans rapport** aux **équations du mouvement**. Une **contrainte secondaire** est une **contrainte non primaire** issu de la **résolution** des **équations du mouvement** (*si celles-ci sont satisfaites*). Elles **apparaissent** avec des **contraintes primaires** qui se **conservent** (*temporellement*), les **contraintes tertiaires**, elles, si les **contraintes secondaires** sont elles-mêmes **conservées**, ...

Une **contrainte de première classe** est une **quantité dynamique** dans un **système Hamiltonien** avec **contraintes** dont le **crochet de Poisson** avec toutes les **autres contraintes** s'**annule** sur la **surface de contraintes** dans l'**espace des phases** (*ensemble des points où les contraintes sont toutes nulles*). Une **contrainte de deuxième classe** est une **contrainte** ayant **au moins un crochet de Poisson non-nul** (sur la **surface de contraintes**) avec les **autres**.

. **Contraintes primaires**

$\Phi_m(q_n, p_n) = 0$, $m \in \llbracket 1, M \rrbracket$, reliant les **variables canoniques** q_n, p_n .

Elles **définissent** une **sous-variété Σ** lisse de l'**espace des phases** (q, p) de **dimension $2N - M$** , la **surface des contraintes primaires**. Et l'**inverse** de l'**image** d'un **point** (q_n, p_n) de Σ de **dimension $2N - M$** n'est **pas unique** : il **forme** une **sous-variété** de **dimension M** dans l'**espace** (q, \dot{q}) . Il faut donc **introduire au moins M paramètres** en plus afin de préciser les **coordonnées** de \dot{q}^n dans la **sous-variété inverse**. On utilise des **multiplicateurs de Lagrange** liés aux **contraintes primaires** et **ajoutés** à l'**hamiltonien canonique**. Si (α_n, β^n) des **fonctions** de l'**espace des phases**, vérifient $\forall (\delta q^n, \delta p_n)$ de l'**espace tangent** à Σ , $\alpha_n \delta q^n + \beta^n \delta p_n = 0$.

Il existe alors des **fonctions** u^j tel que sur la **surface de contrainte**, ($j \in \llbracket 1, M \rrbracket$) $\alpha_i = u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial q_i}$, $\beta^i = u^j \frac{\partial \Phi_j}{\partial p^i}$. En effet, la **sous-variété des contraintes** et donc les **espaces tangents** sont de **dimension** $2N - M$ et les $(\delta q_n, \delta p_n)$ génèrent un **espace vectoriel** de **dimension** $2N - M$. (α_n, β^n) est donc **solution** d'un **système linéaire** d'ordre M . Or les M **gradients** $(\frac{\partial \Phi_j}{\partial q_n}, \frac{\partial \Phi_j}{\partial p_n})$, $j \in \llbracket 1, M \rrbracket$ sont **linéairement indépendants** et vérifient $\alpha_n \delta q^n + \beta^n \delta p_n = 0$: ils **constituent** une **base** de l'espace des **solutions** et les **fonctions** u^j sont alors les **coordonnées** de (α_n, β^n) dans cet **espace**.

. Contraintes secondaires

Les **équations du mouvement impliquent** la **conservation temporelle** des **contraintes primaires** : $\{\Phi_i, H\} + u^j \{\Phi_i, \Phi_j\} \approx 0$, $j \in \llbracket 1, M \rrbracket$. (*Rel* de cohérence*) Cela **contraint** les **fonctions** u^j , ou bien donne une **relation** entre les **variables canoniques**, qui, si elle est **indépendante** des M **contraintes primaires**, génère les **contraintes secondaires**. En **appliquant à nouveau** la **relation de cohérence** génère des **contraintes tertiaires**, ... jusqu'à ce qu'il n'y ait **plus de conditions de cohérence**. On **obtient** ainsi N **nouvelles contraintes** s'ajoutant aux M **contraintes primaires** que l'on suppose également **indépendantes** sur la **surface des contraintes**. On **restreint** alors les **multiplicateurs de Lagrange** :

$$\{\Phi_i, H\} + u^j \{\Phi_i, \Phi_j\} \approx 0, j \in \llbracket 1, M + N \rrbracket$$

Ce sont donc $M + N$ **équations linéaires non homogènes** des **variables** $u^j(p, q)$, $j \in \llbracket 1, M \rrbracket$. Si le **lagrangien** est **cohérent**, le **nombre de solutions** est $L \geq 1$.

Pour une **base** de l'espace des **solutions**, $\{v_l^j, l \in \llbracket 1, L \rrbracket\}$, ces **solutions** sont :

$$u^j = u_0^j + v^l v_l^j, \text{ où } u_0^j : \text{solution particulière et } v^l : \text{fonctions arbitraires.}$$

Les **équations du mouvement** se **réécrivent** alors :

$$\dot{F} \approx \{F, H_{\text{total}}\}, \text{ où } \Phi_l = v_l^j \Phi_j \text{ et } H_{\text{total}} = H + u^j \Phi_j + v^l \Phi_l.$$

. Contraintes de première classe et générateur des transformations de jauge

Une **fonction de première classe** est une **fonction** dont les **crochets de Poisson** s'annulent (\sim) avec **chacune** des **contraintes**.

Une **seconde classification indépendante** en **contraintes de première** et de **deuxième classe** est mieux **adaptée** aux **symétries de jauge**.

. Fixation de la jauge et degrés de liberté (« ddl »)

Les **variables dynamiques** sont **choisies arbitrairement** mais pour un **système de jauge**, sont **décrites** dans un **référentiel spécifique**. Le **choix** d'une **jauge** consiste à **spécifier** un **système de coordonnées** permettant une **correspondance biunivoque** entre **états physiques** et **variables canoniques**. Elle **entraîne** un **système de contraintes supplémentaires** : $C_{\text{jauge}}(q^n, p_n) \approx 0$ qui **précise** l'état **physique**.

Ces **conditions de jauge** doivent être **accessibles** $\forall(\mathbf{q}^i, \mathbf{p}_i)$ (*la surface de contraintes doit être définie pour toute transformation de jauge*) et doivent **fixer totalement la jauge** : pas de **transformation de jauge** hormis l'**identité** préservant la **surface**, d'où $\delta C_{\text{jauge}} = \delta \mathbf{u}^\mu \{C_{\text{jauge}}, \gamma_\mu\} \approx \mathbf{0} \rightarrow \delta \mathbf{u}^\mu = \mathbf{0}$, $\det\{C_{\text{jauge}}, \gamma_\mu\} \neq \mathbf{0}$. (*seconde classe*). Le **nombre de conditions de jauge** est alors celui de **contraintes de première classe**.

. **Nombre de degrés de liberté hamiltoniens** d'un système de **jauge**

Pour $N + N$ **variables canoniques**, A **contraintes de première classe** et B (*pair*) **contraintes de seconde classe**, en **fixant totalement la jauge**, un **système physique équivalent** de $2N$ **variables canoniques** et $2A + B$ **contraintes de seconde classe**, est obtenu. Les **crochets de Dirac** amènent alors à un **système équivalent sans contrainte** de $2N - 2A - B$ **variables canoniques** (**nombre de ddl hamiltoniens**) ou en **formalisme lagrangien** à $N - A - B/2$ **ddl**.

. **Extension aux théories des champs** (*Champs au lieu de particules*)

Idem en considérant une **densité hamiltonienne** $\mathcal{H}_T(\mathbf{x})$ telle que

$\mathbf{H}_T = \int d^3x \mathcal{H}_T(\mathbf{x})$ et en **ajoutant des fonctions de Dirac**, $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})$.

aux **relations de commutation** $\{\mathbf{q}_i(\mathbf{x}), \mathbf{p}^j(\mathbf{y})\} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})\delta_i^j$.

L'évolution d'un **champ** $\Phi(\mathbf{x})$ est ainsi **décrite** par : $\dot{\Phi}(\mathbf{x}) = \{\Phi(\mathbf{x}), \mathbf{H}_T\}$.

- **Multiplicateurs de Lagrange**

Pour des **coordonnées non indépendantes**, liées par des **relations de contraintes**, il faut que le **chemin** soit **construit** selon ces **contraintes**. On peut **évaluer des systèmes non holonomes** sur un **principe de variation** seulement si les **coordonnées** peuvent être **reliées** par des **relations différentielles** telles que : $\sum_j a_{ij} \delta q_j = \mathbf{0}$.

Le **principe de Hamilton** peut être **étendu** aux **systèmes non holonomes**. En **dérivant** les **équations de Lagrange** soit à partir du **principe de Hamilton**, soit du **principe de d'Alembert**, on utilise les **contraintes holonomes** que pour des **variations** des \mathbf{q}_i **indépendantes** entre elles avec $\delta \mathbf{q}_i$: **déplacement virtuel** entre un **point du chemin réel** et un **du chemin proche**. Ainsi, avec des **coordonnées indépendantes**, seul le **chemin de variation final compte**, pas son **établissement**.

Les **équations de contrainte** pour des **déplacements virtuels** sont : $\sum_j a_{ij} \delta q_j = \mathbf{0}$

que les **chemins construits ne vérifient** à priori **pas**. Afin de rendre les **déplacements indépendants** entre eux, on **introduit** des **multiplicateurs de Lagrange**,

λ_i , $i \in \llbracket 1, m \rrbracket$. Les **équations de contrainte** peuvent se réécrire : $\lambda_i \sum_j a_{ij} \delta q_j = \mathbf{0}$.

Les λ_i sont des **grandeurs indéterminées**, **fonctions** des **coordonnées** \mathbf{q} et du **temps** t .

D'autre part, le **principe de Hamilton**, $\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, \dot{\mathbf{q}}_1, \dots, \dot{\mathbf{q}}_n, t) dt = \mathbf{0}$.

doit rester **valable** pour des **systèmes non holonomes**, ce qui **implique**

entre **deux points** 1 et 2 : $\int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) \delta q_j = \mathbf{0}$.

Ces **équations** avec celles de **contrainte** sur les **déplacements virtuels** $\delta \mathbf{q}_i$, en **sommant** les **équations** de **contrainte** puis **intégrant** par rapport au **temps** entre **deux instant** t_1 et t_2 : $\int_{t_1}^{t_2} \sum_{j,i} \lambda_i a_{ij} \delta \mathbf{q}_j = 0$.

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_j} + \sum_i \lambda_i a_{ij} \right) \delta \mathbf{q}_j = 0.$$

m $\delta \mathbf{q}_j$ sont liés et $n - m$ **indépendants** par ces **équations**.

On peut **choisir** λ_i tels que $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_j} + \sum_i \lambda_i a_{ij} = 0$, pour $j = n - m + 1, \dots, n$,

Ainsi, seules les $n - m$ **coordonnées indépendantes** interviennent dans les **équations**

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{j=1}^{n-m} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_j} + \sum_i \lambda_i a_{ij} \right) \delta \mathbf{q}_j = 0. \text{ Les } \delta \mathbf{q}_j \text{ sont alors } \mathbf{indépendants},$$

et pour $j = 1, 2, \dots, n - m$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_j} + \sum_i \lambda_i a_{ij} = 0$.

D'où, $\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_j} = \sum_i \lambda_i a_{ij} = \mathbf{Q}_j$: **équations** de **Lagrange** pour les **systèmes non holonomes**. Il y a donc $n - m$ **inconnues**, les n **coordonnées** \mathbf{q}_i et les **multiplicateurs** de **Lagrange** λ_i , avec n **équations**.

Les $n - m$ **équations restantes** sont celles de **contrainte** : $\sum_j a_{ij} \dot{\mathbf{q}}_j + a_{it} = 0$.

Les **termes** $\sum_i \lambda_i a_{ij} = \mathbf{Q}_j$ sont les **forces généralisées** de **contrainte** : ces **forces ne disparaissent pas** et sont **comprises** dans la **solution**. Le **principe** de **Hamilton** pour les **systèmes non holonomes** **requiert** des **contraintes** qui **ne travaillent pas** pour des **déplacements virtuels**. Avec l'hypothèse de **contraintes sans travail**, on peut **dériver** la **forme complète** des **équations** de **Lagrange non holonomes**.

Condition de **forces** de **contraintes à travail nul** : $\sum_j \mathbf{Q}_j \delta \mathbf{q}_j = 0$. Cela **inclut** les **contraintes holonomes**, $f(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n, t) = 0$ **équivalent** à la **forme différentielle** : $\sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}_j} d\mathbf{q}_j + \frac{\partial f}{\partial t} dt = 0$, soit : $\sum_j a_{ij} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}_j}$, $a_{it} = \frac{\partial f}{\partial t}$ dans l'**équation** de **contraintes**.

On peut ainsi **employer** la **méthode** des **multiplicateurs** de **Lagrange** pour des **contraintes holonomes** sans rendre toutes les **coordonnées indépendantes** ou pour **déterminer** les **forces** de **contraintes**.