



UNIVERSITÉ ABDERRAHMANE MIRA DE BÉJAÏA

Faculté des Sciences Exactes

Département de Physique

Mémoire

Rédigé par : Mlle ICHALLAL Lynda

En vue d'obtention du diplôme de Master en physique

Spécialité : Physique Théorique

Thème :

Introduction aux Systèmes Hamiltoniens avec Contraintes

Soutenu publiquement le 24 Juin 2013 à 11:30 devant le jury :

<i>Président</i>	GHARBI A. H.	<i>Maître de Conférences</i>	Béjaïa
<i>Examineur</i>	BELABBAS A. M.	<i>Maître Assistant</i>	Béjaïa
<i>Encadreur</i>	BELHADI Z.	<i>Maître Assistant</i>	Béjaïa

ALGERIE Année Universitaire 2012-2013

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

A mes grands parents et à mes parents.

A mes frères et soeurs ainsi qu'à leurs familles.

A tous mes oncles et tantes ainsi qu'à leurs familles.

A tous mes enseignants qui m'ont fait part de leur savoir et qui m'ont encadré tout au long de mon cursus scolaire.

Mes dédicaces vont également à tous mes amis(es), copains(es) et surtout ceux de la section physique.

Remerciements

*Je tiens à remercier en premier lieu Monsieur **BELHADI Zahir** pour avoir accepté d'encadrer ce travail. Je lui dois la sincère reconnaissance pour son aide précieuse, sa disponibilité, sa patience et surtout ses conseils.*

*Mes remerciements vont également à l'adresse de Mr **GHARBI A. H.** et Mr **BELABBAS A. M.** pour avoir accepté d'être membres du jury de ma soutenance.*

Je remercie aussi toute ma famille qui m'a encouragé durant mes études, et tous ceux qui ont contribué à la réalisation de ce mémoire.

Table des matières

Introduction générale	5
1 Rappel sur la Mécanique Analytique	7
1.1 Principe de moindre action et équations de Lagrange	8
1.2 Méthode des multiplicateurs de Lagrange	10
1.3 Formalisme hamiltonien	11
1.4 Crochets de Poisson	14
1.5 Quantification canonique	16
2 Contraintes Primaires et Secondaires	18
2.1 Lagrangiens singuliers et contraintes primaires	18
2.2 Exemples importants de lagrangiens singuliers	20
2.2.1 Lagrangiens linéaires par rapport aux vitesses	20
2.2.2 Lagrangiens homogènes par rapport aux vitesses	21
2.2.3 Lagrangiens avec symétrie de jauge	22
2.3 Multiplicateurs de Dirac	23
2.4 Egalité faible et formulation via les crochets de Poisson	25
2.5 Conditions de consistance et contraintes secondaires	26
2.5.1 Le premier cas	27
2.5.2 Le deuxième cas	27
2.5.3 Le troisième cas	28
2.5.4 Le quatrième cas	28
2.6 Solution générale de l'algorithme de Dirac-Bergmann	31
3 Contraintes de Première et de Deuxième Classe et Crochet de Dirac	33
3.1 Contraintes de première et deuxième classe	33
3.2 Contraintes de première classe et symétrie de jauge	35
3.3 Contraintes de deuxième classe et crochet de Dirac	39
3.4 Propriétés du crochet de Dirac	42
3.5 Symétrie de jauge et crochet de Dirac	44

3.6	Quantification canonique des systèmes avec contraintes	46
3.6.1	Quantification de Dirac	47
3.6.2	Quantification des systèmes avec contraintes de deuxième classe	48
3.7	Application à une particule dans un champ magnétique intense .	50
	Conclusion	55
	Bibliographie	57

Introduction

La mécanique analytique est une formulation élégante, très mathématique de la mécanique classique si on la compare à la formulation newtonienne : A partir d'un lagrangien scalaire, il est possible d'avoir les équations du mouvement à l'aide du principe de moindre action issu du calcul des variations, et à l'aide de la transformation de Legendre nous pouvons basculer vers la formulation hamiltonienne. Cette dernière joue un rôle capital si on veut avoir une description quantique des systèmes classiques. Cependant, dans sa version classique, elle se heurte à de grandes difficultés quand le système qu'on souhaite étudier est décrit par un hamiltonien avec contraintes.

Ces systèmes hamiltoniens avec contraintes constituent une certaine classe de systèmes dont les lagrangiens sont singuliers. Autrement dit, les moments conjugués définis à partir de ces derniers ne sont pas tous inversibles par rapport aux vitesses, ce qui est un signe de présence de contraintes dans l'espace des phases. La transformation de Legendre nous permet toujours de construire le hamiltonien mais les équations canoniques doivent être modifiées de telle sorte qu'elles contiennent les contraintes en question.

En physique, ces lagrangiens singuliers sont souvent présents comme c'est le cas en électromagnétisme, en relativité, en interaction faible, . . . En général, les théories de jauge s'accompagnent toujours de contraintes, d'où l'intérêt de Dirac pour ces systèmes particuliers. En effet, c'est la quantification de ces derniers qui pose problème, car les crochets de Poisson ne sont plus adaptés à ce genre de situations, ce qui crée des anomalies quand on fait appel à la quantification canonique d'une façon "naïve".

Pour y remédier, Dirac a mis au point un algorithme consistant en généralisant les crochets de Poisson afin de les rendre adéquats avec les contraintes, permettant ainsi de quantifier une large catégorie de systèmes hamiltoniens issus de lagrangiens singuliers. Parmi les résultats les plus remarquables de cet algorithme, la modification des crochets fondamentaux relatifs aux coordonnées et aux moments conjugués, ce qui peut être une origine physique des travaux mathématiques en géométrie non commutative.

L'objectif de ce mémoire est de donner une introduction à ce formalisme qui

reste un outil de base dont la maîtrise sera très utile en physique théorique. Il va servir de bonne initiation à la recherche scientifique surtout avec l'intérêt grandissant des physiciens pour les méthodes de quantification des systèmes classiques.

Pour y arriver, nous allons scinder notre travail en trois chapitres : Le premier chapitre sera un rappel bref de la mécanique analytique vu la nécessité de revoir certaines notions de base avant d'entamer notre étude. Le deuxième chapitre sera consacré à l'étude des systèmes physiques décrits par des lagrangiens singuliers et la présentation de l'algorithme de Dirac-Bergmann qui va nous permettre de classer nos contraintes en contraintes primaires et secondaires. Le troisième chapitre sera le plus important : Nous allons d'abord diviser les contraintes en contraintes de première et de deuxième classe, ensuite on va montrer que les contraintes de première classe vont générer des transformations de jauge qui laissent invariant l'état du système étudié. Les contraintes de deuxième classe vont nous permettre de définir le crochet de Dirac qui vérifient des propriétés identiques à celles du crochet de Poisson. La dernière étape sera la généralisation de la quantification canonique pour les systèmes avec contraintes.

Chapitre 1

Rappel sur la Mécanique Analytique

Dans la version newtonienne de la mécanique classique, les équations du mouvement d'un système sont données par des relations entre des quantités vectorielles telles que la force \vec{F} , la quantité de mouvement \vec{p} , la vitesse \vec{v} , le moment cinétique \vec{L} ... Par contre, en mécanique analytique, pour décrire un tel système les équations du mouvement s'expriment par des fonctions scalaires comme le lagrangien L , le hamiltonien H , l'action S , ... évitant ainsi le caractère géométrique des variables dynamiques. La physique reste inchangée par rapport au formalisme standard de la mécanique classique (principe fondamentale de la dynamique, théorème de l'énergie cinétique, théorème du moment cinétique...), mais la mécanique analytique constitue un point de vue différent donnant naissance à des formalismes généraux, élégants et puissants. Par exemple, la détermination directe des intégrales premières et la facilité du traitement des contraintes en sont des avantages. Elle joue aussi un rôle essentiel dans la physique moderne, à savoir en physique statistique, en relativité, en mécanique quantique, en théorie des champs,...

Comme le travail de Dirac et Bergmann sur les systèmes lagrangiens singuliers est une généralisation du formalisme hamiltonien aux systèmes ayant des contraintes, il sera très utile de rappeler les concepts et les méthodes de la mécanique analytique indispensables pour aborder une telle question dans le reste de ce mémoire.

1.1 Principe de moindre action et équations de Lagrange

En mécanique analytique, l'état d'un système est parfaitement déterminé à un instant t par la connaissance de ses N coordonnées généralisées $q(t) = (q_1(t), q_2(t), q_3(t), \dots, q_N(t))$ ainsi que ses N vitesses généralisées $\dot{q}(t) = \frac{dq(t)}{dt} = (\dot{q}_1(t), \dot{q}_2(t), \dot{q}_3(t), \dots, \dot{q}_N(t))$. Le nombre N représente la dimension de ce système qui est aussi le nombre de ses degrés de liberté. Pour étudier l'évolution de ce dernier, on lui associe une action $S(q)$ qui est une fonctionnelle de $q(t)$ définie par intégrale suivante :

$$S(q) = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \quad (1.1)$$

où $L(q(t), \dot{q}(t), t)$ est le lagrangien du système et (t_i, t_f) sont les instants initial et final. Le système peut prendre une infinité de chemins pour aller d'un point $q(t_i)$ occupé à l'instant t_i vers un point $q(t_f)$ occupé en t_f , mais le principe de moindre action (principe de Hamilton) veut que la trajectoire physique soit le chemin qui rend l'action extrémale (minimale, maximale). Autrement dit, il faut que la variation

$$\delta S(q) = \delta \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt = 0 \quad (1.2)$$

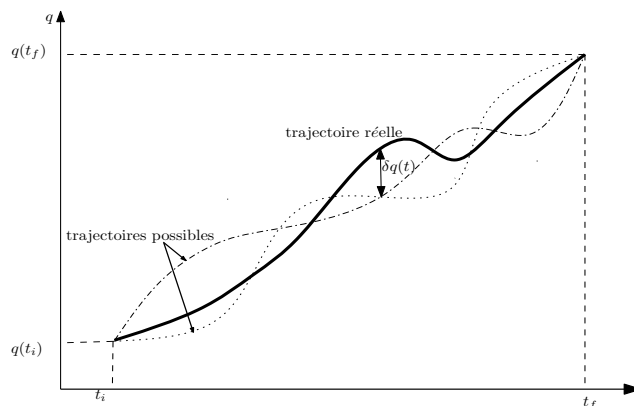


Figure 1 : la trajectoire physique est celle qui rend l'action S extrémale.

Ce principe sert à nous fournir les équations du mouvement de notre système. En effet,

$$\begin{aligned}
\delta S(q) &= \int_{t_i}^{t_f} \delta L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt \quad i = 1 \dots N \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \frac{d}{dt} q_i \right] dt = \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \delta q_i \right] dt \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i \right] dt \\
\delta S(q) &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \delta q_i dt + \underbrace{\sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_i}^{t_f}}_{=0} \quad (1.3)
\end{aligned}$$

Le dernier terme est nul, car $\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0$ (toutes les trajectoires passent par les points $q(t_i)$ et $q(t_f)$, donc elles ne subissent pas de variations en ces points), ce qui nous donne

$$\delta S(q) = \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \delta q_i dt \quad (1.4)$$

Puisque les coordonnées généralisées $q(t)$ sont indépendantes, les variations $\delta q(t)$ le sont aussi. Donc, pour que l'action $S(q)$ soit stationnaire ($\delta S(q) = 0$) il faut et il suffit que

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (1.5)$$

Ces équations différentielles de deuxième degré sont les équations d'Euler-Lagrange qui déterminent l'évolution de notre système. Nous voyons bien que le principe de moindre action joue un rôle crucial en physique car c'est grâce à son utilisation qu'on accède aux équations du mouvement.

Le lagrangien n'est pas unique, car si on remplace L par $\tilde{L} = \alpha L + \frac{df(q,t)}{dt}$ dans l'expression de l'action $S(q)$ on obtiendra les mêmes équations d'Euler-Lagrange à condition que α soit une constante réelle et $f(q,t)$ une fonction du temps et des coordonnées généralisées seulement. En effet,

$$\begin{aligned}
\delta \tilde{S}(q) &= \delta \int_{t_i}^{t_f} \tilde{L} dt = \delta \int_{t_i}^{t_f} \left(\alpha L + \frac{df(q,t)}{dt} \right) dt \\
&= \alpha \int_{t_i}^{t_f} \delta L dt + \int_{t_i}^{t_f} \delta \frac{df(q,t)}{dt} dt = \alpha \delta S(q) + \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} \delta f(q,t) dt \\
&= \alpha \delta S(q) + [\delta f(q,t)]_{t_i}^{t_f} = \alpha \delta S(q) + \delta f(q_i, t_i) - \delta f(q_f, t_f)
\end{aligned}$$

Comme toutes les trajectoires passent par les points (q_i, t_i) et (q_f, t_f) , la fonction $f(q,t)$ ne subit aucune variation en ces derniers, ce qui veut dire que $\delta f(q_i, t_i)$

$= \delta f(q_f, t_f) = 0$ d'où $\delta \tilde{S}(q) = \alpha \delta S(q)$. Maintenant, si on applique le principe de moindre action à $\tilde{S}(q)$ ($\delta \tilde{S}(q) = 0$), l'égalité précédente impliquera que $\delta S(q) = 0$ et on obtiendra les mêmes équations d'Euler-Lagrange (1.5).

Avant d'entamer le paragraphe suivant, il sera très utile de donner quelques expressions du lagrangien dans certains cas précis.

* En mécanique classique, le lagrangien est la différence entre l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle U . Dans le cas d'une seule particule de masse m repérée par les coordonnées (x, y, z)

$$L = T(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) - U(x, y, z) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(x, y, z, t) \quad (1.6)$$

* En présence d'un potentiel électromagnétique $(\vec{A}(x, y, z, t), V(x, y, z, t))$, notre particule de charge q_e aura le lagrangien

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + q_e (\vec{v} \cdot \vec{A} - V) \quad (1.7)$$

avec le vecteur vitesse $\vec{v} = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$, et le point (\cdot) pour indiquer le produit scalaire.

Dans les deux cas, le lagrangien est choisi de telle manière qu'il soit le plus simple possible et que les équations d'Euler-Lagrange coïncident avec les équations de Newton.

1.2 Méthode des multiplicateurs de Lagrange

Un système mécanique peut subir des contraintes qui sont à l'origine des forces de liaison. Dans ce cas, les grandeurs physiques ne peuvent pas varier indépendamment les unes des autres. Deux types de contraintes apparaissent en pratique :

* Les liaisons **holonomes** ayant la forme $\phi(q(t), t) = 0$, ce qui veut dire qu'elles dépendent uniquement du temps et des coordonnées généralisées $q(t)$.

* Les liaisons **non holonomes** de la forme $\phi(q, \dot{q}, t) = 0$ ou $\phi(q, \dot{q}, t) \geq 0$ dépendant non seulement des coordonnées généralisées des points matériels mais aussi des vitesses généralisée et peuvent être des inégalités.

Dans notre cas on s'intéresse seulement aux contraintes holonomes et pour les prendre en considération dans les équations du mouvement on fera appel à la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Supposons alors que nous disposons de M contraintes holonomes $\phi_m(q(t), t) = 0$, $m = 1 \dots M$. Si L est le lagrangien du départ de notre système de N degrés de liberté, la méthode des multiplicateurs qu'on va noter $\lambda_m = \lambda_m(t)$, $m = 1 \dots M$ consiste à introduire un nouveau

Lagrangien

$$\tilde{L} = L + \sum_{m=1}^M \lambda_m(t) \phi_m(q, t) \quad (1.8)$$

et lui appliquer les équations d'Euler Lagrange comme s'il s'agissait d'un système de $N + M$ degrés de liberté (q, λ) . Autrement dit,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_i} &= 0 & i = 1 \dots N \\ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \lambda_m} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\lambda}_m} &= 0 & m = 1 \dots M \end{aligned} \quad (1.9)$$

Comme \tilde{L} ne dépend pas de $\dot{\lambda}_m$ ($\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\lambda}_m} = 0$), les dernières équations se ramènent à cette expression :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_i} = 0 &\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = - \sum_{m=1}^M \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} & i = 1 \dots N \\ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \lambda_m} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\lambda}_m} = 0 &\Rightarrow \phi_m(q, t) = 0 & m = 1 \dots M \end{aligned} \quad (1.10)$$

On retrouve bien les contraintes du départ et le système (1.9) peut s'écrire sous la forme.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} &= \sum_{m=1}^M \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} & i = 1 \dots N \\ \phi_m(q, t) &= 0 & m = 1 \dots M \end{aligned} \quad (1.11)$$

La résolution de ces équations va nous donner l'évolution de l'état de notre système sous l'effet des différentes contraintes $\phi_m(q, t) = 0$, $m = 1 \dots M$.

1.3 Formalisme hamiltonien

Dans la formulation Lagrangienne, l'évolution d'un système mécanique à N dimensions est régie par N équations différentielles du second ordre par rapport au temps, et leur solution décrit une trajectoire $q(t) = (q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t))$ dans l'espace de configuration. William Hamilton a développé un autre formalisme équivalent qui fait appel à $2N$ équations différentielles du premier ordre pour décrire notre système de N degrés de liberté. Le nombre de variables d'état est égal à $2N$ et elles sont les coordonnées généralisées et les moments conjugués $(q, p) = (q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t))$ considérées comme étant indépendantes évoluant dans l'espace des phases. La résolution analytique ou numérique de ces équations est plus simple que celles de l'approche Lagrangienne.

Pour passer du formalisme lagrangien au formalisme hamiltonien, on utilise la transformation de Legendre qui va nous permettre de construire la fonction de Hamilton $H(q, p, t)$ à partir de la fonction de Lagrange $L(q, \dot{q}, t)$. D'abord, on introduit les N nouvelles variables $p = (p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t))$ appelées les moments conjugués par définis par la relation

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q, \dot{q}, t) \quad i = 1 \dots N \quad (1.12)$$

On peut ainsi écrire les équations d'Euler-Lagrange sous la forme

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad i = 1 \dots N \quad (1.13)$$

Les équations (1.12) doivent être inversées par rapport aux vitesses généralisées \dot{q} afin de les remplacer par leurs expressions $\dot{q} = \dot{q}(q, p, t)$ dans le hamiltonien $H(q, p, t)$ défini comme suit :

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i(q, p, t) - L = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L \quad (1.14)$$

A ce stade, on peut calculer la différentielle exacte du hamiltonien H . Autrement dit, en utilisant les relations (1.12) et (1.13), on aura

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^N p_i d\dot{q}_i - dL \\ &= \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^N p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^N p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^N \dot{p}_i dq_i - \sum_{i=1}^N p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned}$$

Finalement

$$dH = \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^N \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.15)$$

Mais il ne faut pas perdre de vue que le hamiltonien $H(q, p, t)$ est une fonction des coordonnées généralisées q , des moments conjugués p et du temps t seulement, d'où

$$dH = \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (1.16)$$

Par identification des deux dernières équations on obtient les équations canoniques de Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} & i &= 1 \dots N \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} & i &= 1 \dots N \\ \frac{\partial L}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.17)$$

Il est possible d'avoir ces équations en passant par le principe de moindre action : d'abord, il faut remarque que

$$H = \sum_{i=1}^N (p_i, \dot{q}_i) - L \quad \Rightarrow \quad L = \sum_{i=1}^N (p_i, \dot{q}_i) - H \quad (1.18)$$

Remplaçons dans l'action (1.1) et déterminons la trajectoire $(q(t), p(t))$ qui la rend extrémale.

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_i}^{t_f} \delta \left(\sum_{i=1}^N (p_i, \dot{q}_i) - H(q, p, t) \right) dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\delta p_i \dot{q}_i + p_i \delta \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\delta p_i \dot{q}_i + (p_i \frac{d}{dt} (\delta q_i)) - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\delta p_i \dot{q}_i + \left(\frac{d}{dt} (p_i \delta q_i) - \dot{p}_i \delta q_i \right) - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} (p_i \delta q_i) dt + \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right) dt \\ &= \left[\sum_{i=1}^N (p_i \delta q_i) \right]_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left(\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right) dt \end{aligned}$$

Le premier terme est nul car tous les chemins passent par les extrémités $q(t_i)$ et $q(t_f)$ ce qui veut dire que $(\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0)$. Finalement

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \left[\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right] dt \quad (1.19)$$

Comme toutes les variables (q, p) sont indépendantes, il en résulte que les variations $(\delta q, \delta p)$ le sont aussi, ce qui implique que le seul moyen de satisfaire la condition $\delta S = 0$ est d'imposer à la trajectoire physique de vérifier les équations canoniques

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad i = 1, \dots, N \quad (1.20)$$

En utilisant ces équations, on peut démontrer que H est conservé s'il ne dépend pas explicitement du temps t . Autrement dit,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1.21)$$

En effet, à l'aide des équations canoniques, on voit que

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial q_i} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial H}{\partial p_i} \left(-\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial t}\end{aligned}$$

Si le lagrangien est la différence entre l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle U , le hamiltonien sera égal à leur somme qui est aussi l'énergie mécanique E . Donc, dans le cas d'une seule particule de masse m ayant les coordonnées (x, y, z) et le lagrangien (1.6), le hamiltonien aura l'expression ci-dessous.

$$H = T(p_x, p_y, p_z) + U(x, y, z) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z, t) = E \quad (1.22)$$

En présence d'un potentiel électromagnétique $(\vec{A}(x, y, z, t), V(x, y, z, t))$, le hamiltonien construit à partir du lagrangien (1.7) aura la forme suivante :

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q_e \vec{A})^2 + q_e V \quad (1.23)$$

où $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$, et le $(^2)$ pour indiquer le produit scalaire.

1.4 Crochets de Poisson

Depuis leur invention il y a deux siècles, les crochets de Poisson n'ont cessé d'être d'une grande importance dans divers domaines de la physique mathématique. Ils sont par exemple indispensables dans l'étude de l'intégrabilité des systèmes classiques et dans la quantification canonique. Dans cette section, nous allons rappeler brièvement quelques propriétés de ces crochets.

Soit $f = f(q, p, t)$ une grandeur physique qui dépend des coordonnées généralisées, des moments conjugués et du temps. Sa dérivée totale par rapport au temps est

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \quad (1.24)$$

Faisons appel aux équations canoniques (1.20) pour aboutir à la forme

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}\end{aligned} \quad (1.25)$$

où on vient d'introduire le crochet de Poisson $\{f, H\}$. Dans le cas général, le crochet de Poisson de deux fonction $f(q, p, t)$ et $g(q, p, t)$ est défini par

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \quad (1.26)$$

Les équations canoniques du mouvement peuvent s'exprimer en fonction de ces crochets. Il suffit de prendre $f = q_i$ ensuite $f = p_i$ et d'utiliser la relation (1.25) pour avoir

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\} \quad i = 1 \dots N \quad (1.27)$$

Les crochets fondamentaux sont les crochets relatifs aux variables canoniques (q, p) . Pour les calculer, on peut utiliser la définition (1.26) et après une petite manipulation, on trouve que

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad i, j = 1 \dots N \quad (1.28)$$

où δ_{ij} est le symbole Kronecker ($\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$ et $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$).

Si α et β sont deux réels, et f, g et h trois fonctions qui dépendent de q, p et t , alors, on déduit aussi de l'expression (1.26) les propriétés suivantes des crochets de Poisson.

$$\begin{aligned} \{f, g\} &= -\{g, f\} \Rightarrow \{f, f\} = 0 && \text{(Antisymétrie)} \\ \{\alpha f + \beta g, h\} &= \alpha \{f, h\} + \beta \{g, h\} && \text{(Linéarité)} \\ \{fg, h\} &= f \{g, h\} + \{f, h\} g && \text{(Règle de Leibniz 1)} \\ \{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} &= 0 && \text{(Identité de Jacobi)} \\ \left\{ \frac{df}{dt}, g \right\} + \left\{ f, \frac{dg}{dt} \right\} &= \frac{d}{dt} \{f, g\} && \text{(Règle de Leibniz 2)} \end{aligned} \quad (1.29)$$

Les intégrales premières du mouvement $f_k(q, p, t)$ qui se conservent au cours du temps ($\frac{df_k}{dt} = 0$) peuvent être obtenues à l'aide des crochets de Poisson en utilisant l'équation (1.25). Autrement dit, les f_k doivent vérifier l'équation

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \{f_k, H\} = 0 \quad (1.30)$$

Si en plus, les intégrales premières ne dépendent pas explicitement du temps, leurs crochets de Poisson avec le hamiltonien seront nuls.

$$\{f_k, H\} = 0 \quad (1.31)$$

On peut montrer aussi que si f et g sont deux intégrales premières du mouvement, leur crochet de Poisson est une intégrale première. Donc si $\frac{df}{dt} = 0$ et

$\frac{dg}{dt} = 0$ alors $\frac{d}{dt} \{f, g\} = 0$. En effet, à l'aide de l'équation (1.25) et des propriétés (1.29) des crochets de Poisson on peut voir que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \{f, g\} &= \frac{\partial}{\partial t} \{f, g\} + \{H, \{f, g\}\} \\
&= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\} - \{g, \{H, f\}\} - \{f, \{g, H\}\} \\
&= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\} + \{\{H, f\}, g\} + \{f, \{H, g\}\} \\
&= \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} + \{H, g\} \right\} \\
&= \left\{ \frac{df}{dt}, g \right\} + \left\{ f, \frac{dg}{dt} \right\} \\
&= \{0, g\} + \{f, 0\} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Une fois que deux intégrales premières sont connues, on déduira facilement une troisième en prenant leur crochet de Poisson.

1.5 Quantification canonique

La mécanique classique permet de décrire l'évolution d'un système macroscopique au cours du temps d'une façon déterministe en connaissant son état initial. Un des problèmes centraux de la physique théorique est l'analyse du comportement d'un système à l'échelle microscopique, où l'approximation classique cesse d'être valable. Autrement dit, il s'agit de quantifier la version classique pour avoir une description quantique d'un certain nombre de phénomènes régis par les trois interactions fondamentales, l'électromagnétisme et les interactions nucléaires faible et forte. La quatrième interaction fondamentale qui est la gravitation reste toujours sans description quantique pleinement cohérente.

La quantification d'un système classique décrit par le formalisme hamiltonien se fait de la manière suivante : aux grandeurs classiques $f(q, p, t)$ et $g(q, p, t)$ définies dans l'espace des phases, on va associer des opérateurs hermitiques $\hat{f} = f(\hat{q}, \hat{p}, t)$ et $\hat{g} = g(\hat{q}, \hat{p}, t)$ agissant dans l'espace de Hilbert (l'espace des états) dont le commutateur vérifie la relation

$$[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = i\hbar \widehat{\{f, g\}} \quad (1.32)$$

où $\widehat{\{f, g\}}$ est l'opérateur associé au crochet de Poisson $\{f, g\}$, $\hbar = h/2\pi$ est la constante de Planck réduite et le nombre imaginaire i pour s'assurer que la partie à droite est hermitique si \hat{f} et \hat{g} le sont. Avec la définition (1.32), les commutateurs satisfont toutes les propriétés (1.29). Il est à signaler que cette manière de faire les choses n'est pas aussi simple comme il en apparaît, car il y a apparition d'un problème majeur lié à l'ordre des opérateurs qui ne commutent pas généralement. Heureusement qu'une grande partie des systèmes physiques sont décrit d'une façon simple, ce qui facilite leur quantification. Dans le cas particulier des $2N$ variables fondamentales q_i, p_j , leurs opérateurs correspondants

\hat{q}_i et \hat{p}_j obéissent aux relations de commutation suivantes

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad i, j = 1 \dots N \quad (1.33)$$

Dans la représentation de Heisenberg, les opérateurs évoluent dans le temps tandis que l'état $|\Psi\rangle_H$ du système reste inchangé. L'évolution temporelle d'un opérateur \hat{A} est régie par l'équation

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \quad (1.34)$$

sachant que \hat{H} est l'opérateur hamiltonien du système. Il est facile d'en déduire les équations de Heisenberg suivantes :

$$\frac{d\hat{q}_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}_i, \hat{H}] \quad i = 1 \dots N \quad (1.35)$$

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}] \quad i = 1 \dots N \quad (1.36)$$

Par contre la représentation de Schrödinger suppose que les opérateurs restent constants, mais l'état $|\Psi(t)\rangle_S$ varie dans le temps en obéissant à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle_S = \hat{H} |\Psi(t)\rangle_S$$

Les deux représentations sont différentes mais équivalentes physiquement car elles sont liées par une transformation unitaire et permettent de faire les mêmes prédictions sur le plan expérimental.

Chapitre 2

Contraintes Primaires et Secondaires

L'objectif principal de ce chapitre est de donner plusieurs catégories de systèmes lagrangiens singuliers qui donnent naissances à des contraintes quand on passe à la description hamiltonienne. Nous allons d'abord généraliser les équations de Hamilton à des systèmes avec contraintes en introduisant les multiplicateurs de Dirac, ensuite définir ce qu'on va appeler les égalités faibles afin de pouvoir utiliser les crochets de Poisson. Ensuite, on va voir que les contraintes doivent satisfaire certaines conditions de consistance, ce qui va donner naissances à d'autres contraintes secondaires qui doivent vérifier à leur tour d'autres conditions de consistance. C'est l'algorithme de Dirac-Bergmann. A la fin de cet algorithme, on va déterminer toutes les contraintes de notre système et tous les multiplicateurs de Dirac.

2.1 Lagrangiens singuliers et contraintes primaires

On a vu dans le chapitre précédent que dans le cas d'un système décrit par N coordonnées généralisées et leurs vitesses associées, le principe de moindre action conduit aux équations d'Euler-Lagrange¹

$$\begin{aligned} \delta S(q) = 0 &\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 && i = 1 \dots N \\ &\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} - \dot{q}_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial q_j} - \ddot{q}_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} = 0 && i, j = 1 \dots N \end{aligned} \quad (2.1)$$

¹Dans la suite de ce mémoire, nous allons utiliser la convention d'Einstein en sommant sur les indices répétés deux fois dans une expression mathématique

Les dernières équations peuvent se mettre sous la forme

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \dot{q}_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial q_j} \quad i, j = 1 \dots N \quad (2.2)$$

On voit bien apparaître les accélérations \ddot{q}_j qui peuvent être exprimées en fonction des positions q_i et les vitesses \dot{q}_i à la condition que la matrice hessienne $H = [H_{ij}] = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right]$ soit inversible. En d'autre terme, il faut que son déterminant soit différent de zéro.

$$\det(H) \neq 0 \quad (2.3)$$

où

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_1} & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_N} \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2 \partial \dot{q}_1} & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2 \partial \dot{q}_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2 \partial \dot{q}_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N \partial \dot{q}_1} & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N \partial \dot{q}_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N \partial \dot{q}_N} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Dans ce cas, le lagrangien de notre système est régulier. Maintenant, si $\det(H) = 0$, on aura à partir des équations d'Euler-Lagrange (2.2) des relations entre les coordonnées et les vitesses généralisées indépendantes des accélérations, or que les lois du mouvement doivent dépendre des accélérations selon Newton ($m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i$). Cela veut dire que notre lagrangien est singulier.

Exemple :

Soit le lagrangien $L = \frac{(y\dot{x} + x\dot{y})^2}{2}$ qui dépend des deux coordonnées (x, y) et les vitesses (\dot{x}, \dot{y}) . La matrice hessienne dans ce cas sera

$$H = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial \dot{x}_j} \right] = \begin{bmatrix} y^2 & xy \\ xy & x^2 \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad (\dot{x}_1, \dot{x}_2) = (\dot{x}, \dot{y})$$

Le déterminant de la matrice H est nul ($\det H = y^2 x^2 - xyxy = 0$), donc ce lagrangien est singulier.

Maintenant, essayons de voir l'impact de la singularité d'un lagrangien autonome $L = L(q, \dot{q})$ sur la formulation hamiltonienne. Commençons par définir les moments conjugués

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q, \dot{q}) \quad i = 1 \dots N \quad (2.5)$$

Pour continuer, on doit les inverser par rapport aux vitesses \dot{q} mais d'après le théorème des fonctions implicites, pour que ça soit possible, il faut que la matrice jacobienne $\left[\frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_j} \right]$ soit inversible. D'après l'équation précédente

$$\left[\frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_j} \right] = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right] = H \quad (2.6)$$

et on retrouve la matrice hessienne H . Si notre lagrangien est singulier, la matrice H ne sera pas inversible et on ne pourra pas exprimer toutes les vitesses en fonctions des coordonnées et les moments conjugués à l'aide des définitions (2.5). Cela implique que si $M = \dim(H) - \text{rang}(H)$, on aura M relations $\phi_m(q, p) = 0$, $m = 1 \dots M$ liant les coordonnées et les moments conjugués sans faire intervenir les vitesses. Ces relations sont appelées les contraintes primaires de la formulation hamiltonienne. On qualifie aussi de contraintes primaires les restrictions que nous allons nous même imposer à notre système².

A ce stade, il faut savoir qu'il n'y a pas un choix unique de ces contraintes car on peut toujours les redéfinir. Par exemple si $\phi_m = 0$ et $\phi_n = 0$ sont des contraintes, alors ϕ_m^2 , $|\phi_m|$, $2\phi_m - 3\phi_n$, $\phi_m \cdot \phi_n$, $\sqrt{\phi_m}$, $\phi_m e^\alpha$, ... le sont aussi. Mais il y a certaines conditions de régularité qu'il faut satisfaire dans le choix des contraintes : elles doivent être indépendantes, dérivables par rapport à leurs arguments et ont des différentielles non nulles quand on remplace ces contraintes par des zéro³.

Avant de passer à la section suivante, revenons à l'exemple précédent. D'après la définition des moments conjugués

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = y(y\dot{x} + x\dot{y}) \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = x(y\dot{x} + x\dot{y}) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad xp_x = yp_y \quad \Rightarrow \quad xp_x - yp_y = 0$$

Il y a bien une seule contrainte primaire $\phi_1 = xp_x - yp_y = 0$. Ici on peut par exemple choisir $\phi_1 = -xp_x + yp_y = 0$, mais il faut éviter les choix du type $\phi_1 = \sqrt{xp_x - yp_y} = 0$, $\phi_1 = |xp_x - yp_y| = 0$ et $\phi_1 = \frac{x}{y}p_x - p_y = 0$ car ça va nous poser des problèmes liés aux domaines de définition et à la dérivation. Il ne faut pas non plus prendre $\phi_1 = (xp_x - yp_y)^2 = 0$ qui implique que $d\phi_1 = 2 \underbrace{(xp_x - yp_y)}_{=0} d(xp_x - yp_y) = 0$.

2.2 Exemples importants de lagrangiens singuliers

2.2.1 Lagrangiens linéaires par rapport aux vitesses

Ces lagrangiens sont linéaires au moins par rapport à une vitesse généralisée ce qui engendre directement des contraintes primaires car la vitesse en question

²Voir le troisième exemple de la sous-section (2.5.4)

³Pour plus de détails, consulter la référence [2] page 7

va disparaître après dérivation. Soit par exemple le lagrangien $L = -y\dot{x} + x\dot{y} - V(x, y)$. D'après la définition des moments conjugués

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = -y & \Rightarrow & y + p_x = 0 \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = x & \Rightarrow & x - p_y = 0 \end{aligned}$$

Nous sommes en présence de deux contraintes primaires $\phi_1 = y + p_x$ et $\phi_2 = x - p_y$. Comme ce lagrangien est linéaire par rapport aux vitesses, les composantes de la matrice hessienne H sont nulles ($H_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial \dot{x}_j} = 0$, avec $(\dot{x}_1, \dot{x}_2) = (\dot{x}, \dot{y})$). On remarque directement que le $\det(H) = 0$ ainsi que le $\text{rang}(H) = 0$, d'où le nombre de contraintes M qui égal à deux ($M = \dim(H) - \text{rang}(H) = 2 - 0 = 2$).

En théorie quantique des champs, la densité lagrangienne L du champ de Dirac $\psi(t, \vec{x})$ qui sert à décrire les particules fermioniques de spin $\frac{1}{2}$ est un bon exemple aussi de lagrangien linéaire par rapport aux vitesses. En effet,

$$L = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi = i\bar{\psi} \gamma^0 \partial_0 \psi + i\bar{\psi} \gamma^i \partial_i \psi - m\bar{\psi} \psi$$

où les γ^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) sont les quatre matrices de Dirac et $\bar{\psi}(t, x) = \psi^\dagger(t, x) \gamma^0$. On voit que L est linéaire par rapport à $\partial_0 \psi$ et que $\partial_0 \bar{\psi}$ ne figure même pas dans son expression, ce qui veut dire qu'il y a une singularité.

2.2.2 Lagrangiens homogènes par rapport aux vitesses

Un lagrangien $L(q, \dot{q}, t)$ est dit homogène par rapport aux vitesses s'il vérifie la relation

$$L(q, \lambda \dot{q}, t) = \lambda L(q, \dot{q}, t) \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Ce type de lagrangiens présente aussi des contraintes primaires comme le montre l'exemple du lagrangien $L(x, y, \dot{x}, \dot{y}) = \frac{m\dot{x}^2}{2\dot{y}} - V(x) \dot{y}$. D'abord, il est homogène par rapport aux vitesses car

$$L(x, y, \lambda \dot{x}, \lambda \dot{y}) = \frac{m\lambda^2 \dot{x}^2}{\lambda \dot{y}} - V(x) \lambda \dot{y} = \lambda \left(\frac{m\dot{x}^2}{\dot{y}} - V(x) \dot{y} \right) = \lambda L(x, y, \dot{x}, \dot{y})$$

Les moments conjugués sont donnés par

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{m\dot{x}}{\dot{y}} \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = -\frac{m\dot{x}^2}{2\dot{y}^2} - V(x) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad p_y + \frac{p_x^2}{2m} + V(x) = 0$$

Donc $\phi_1 = p_y + \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$ constitue une contrainte primaire.

Le lagrangien d'une particule relativiste est aussi un lagrangien homogène par rapport aux vitesses. En relativité restreinte l'action d'une particule libre est donné par

$$S = \alpha \int \sqrt{\eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu}$$

où $x^\mu = (x^0 = ct, x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z)$ représente le quadrivecteur position de notre particule, $\eta_{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$ est la métrique de Minkowski et α une constante liée à la masse. Choisissons un paramètre réel τ pour paramétriser la ligne d'univers de cette particule de telle sorte que $x^\mu = x^\mu(\tau)$. On aura alors

$$S = \alpha \int \sqrt{\eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu} = \alpha \int \sqrt{\eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau}} d\tau = \int L d\tau \quad \Rightarrow \quad L = \alpha \sqrt{\eta_{\mu\nu} \dot{x}^\mu \dot{x}^\nu}$$

où $\dot{x}^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}$. On vérifie facilement que ce lagrangien est homogène par rapport aux vitesses \dot{x}^μ .

$$L(x^\mu, \lambda \dot{x}^\mu) = \alpha \sqrt{\eta_{\mu\nu} \lambda^2 \dot{x}^\mu \dot{x}^\nu} = \lambda \alpha \sqrt{\eta_{\mu\nu} \dot{x}^\mu \dot{x}^\nu} = \lambda L(x^\mu, \dot{x}^\mu)$$

Donc, on s'attend à avoir des contraintes primaires lors de passage à la formulation hamiltonienne, car ce lagrangien est singulier.

2.2.3 Lagrangiens avec symétrie de jauge

Il s'agit de lagrangiens invariants sous une transformation de coordonnées dépendant de fonctions arbitraires de temps (transformation de jauge). Ces lagrangiens sont singuliers et présentent des contraintes primaires comme c'est le cas du lagrangien $L = \frac{(\dot{x}-\dot{y})^2}{2} + \frac{(x-y)^2}{2}$. En effet, soit la transformation de jauge suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x + \varepsilon(t) & \Rightarrow & \frac{d\tilde{x}}{dt} = \dot{x} + \dot{\varepsilon}(t) \\ \tilde{y} &= y + \varepsilon(t) & & \frac{d\tilde{y}}{dt} = \dot{y} + \dot{\varepsilon}(t) \end{aligned}$$

où $\varepsilon(t)$ est une fonction quelconque dépendant du temps. Notre lagrangien est invariant sous cette transformation.

$$\tilde{L} = L(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{(\dot{x} + \dot{\varepsilon}(t) - \dot{y} - \dot{\varepsilon}(t))^2}{2} + \frac{(x + \varepsilon(t) - y - \varepsilon(t))^2}{2} = \frac{(\dot{x} - \dot{y})^2}{2} + \frac{(x - y)^2}{2}$$

Ce lagrangien possède effectivement une contrainte primaire car

$$\begin{aligned} p_x &= \dot{x} - \dot{y} \\ p_y &= \dot{y} - \dot{x} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \phi_1 = p_x + p_y = 0$$

La densité lagrangienne L relative au champ de Maxwell est un bon exemple physique aussi de ce genre. Si V est le potentiel scalaire et \vec{A} est le potentiel vecteur, alors

$$L = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$$

où $A_\mu = \left(\frac{V}{c}, \vec{A}\right)$, $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ et c est la vitesse de la lumière dans le vide. Une transformation de jauge de la forme $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \Lambda$ où Λ est une fonction scalaire quelconque de \vec{x} et de t laisse notre lagrangien invariant, ce qui implique qu'il est singulier.

2.3 Multiplicateurs de Dirac

Dans le cas d'un lagrangien régulier, le hamiltonien canonique $H_c(q, p) = p_i \dot{q}_i - L$, ($i = 1 \dots N$) est défini dans un espace de phase de dimension $2N$, mais la présence des contraintes primaires $\phi_m = 0$, ($m = 1 \dots M$) réduit la dimension de cet espace. Néanmoins, Il faut savoir qu'il est toujours possible de construire H_c de telle sorte qu'il soit indépendant des vitesses⁴ généralisées \dot{q} . Pour prendre en considération ces contraintes, on va procéder par analogie au formalisme lagrangien avec contraintes en remplaçant le hamiltonien canonique H_c par le hamiltonien total

$$H_T = H_c + \lambda_m \phi_m(q, p) \quad (2.7)$$

où les quantités λ_m seront appelées les multiplicateurs de Dirac. Cette modification a pour conséquence une nouvelle action pour notre système. Les équations du mouvement de ce dernier s'obtiennent en exigeant que cette action soit stationnaire ($\delta S = 0$).

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_i}^{t_f} [p_i \dot{q}_i - H_T] dt = \int_{t_i}^{t_f} \delta [p_i \dot{q}_i - (H_c + \lambda_m \phi_m)] dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} [\delta p_i \dot{q}_i + p_i \delta \dot{q}_i - \delta H_c - \delta \lambda_m \phi_m - \lambda_m \delta \phi_m] dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} [\dot{q}_i \delta p_i + \left(\frac{d}{dt} (p_i \delta q_i) - \dot{p}_i \delta q_i \right) - \frac{\partial H_c}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H_c}{\partial p_i} \delta p_i \\ &\quad - \delta \lambda_m \phi_m - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} \delta q_i - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} \delta p_i] dt \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} (p_i \delta q_i) dt + \int_{t_i}^{t_f} \left[\left(-\dot{p}_i - \frac{\partial H_c}{\partial q_i} - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right. \\ &\quad \left. + \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H_c}{\partial p_i} - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \phi_m \delta \lambda_m \right] dt \\ &= p_i \delta q_i \Big|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \left[\left(-\dot{p}_i - \frac{\partial H_c}{\partial q_i} - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} \right) \delta p_i \right. \\ &\quad \left. + \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H_c}{\partial p_i} - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} \right) \delta q_i - \phi_m \delta \lambda_m \right] dt \end{aligned}$$

Le premier terme est nul à cause des conditions aux limites. Pour avoir la dynamique de notre système, décrit par l'hamiltonien $H_T(p, q)$, il faut imposer la

⁴Pour la démonstration, voir la référence [6] page 725

condition $\delta S = 0$. Les équations du mouvement qui en résultent sont :

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H_c}{\partial q_i} - \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} & i &= 1 \dots N \\ \dot{q}_i &= \frac{\partial H_c}{\partial p_i} + \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} & i &= 1 \dots N \\ \phi_m &= 0 & m &= 1 \dots M \end{aligned} \quad (2.8)$$

Il s'agit des équations canoniques de Hamilton qui tiennent compte de la présence des contraintes.

Exemple

Considérons le lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + x\dot{y} - V(x, y)$ dépendant des deux variables de position (x, y) , et des vitesses associées (\dot{x}, \dot{y}) . Les moments conjugués sont $p_x = \dot{x}$ et $p_y = x$. On remarque que le moment conjugué p_x est exprimé par la vitesse \dot{x} , alors que p_y ne dépend pas des vitesses, d'où l'existence de la contrainte primaire $\phi_1 = p_y - x = 0$. Le hamiltonien canonique est

$$\begin{aligned} H_c &= \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = (p_x)^2 + \dot{y}p_y - \frac{1}{2}(p_x)^2 - x\dot{y} + V(x, y) \\ &= \frac{1}{2}(p_x)^2 + \underbrace{(p_y - x)\dot{y}}_{=\phi_1} + V(x, y) \end{aligned}$$

$$H_c = \frac{1}{2}(p_x)^2 + V(x, y)$$

On voit bien que le hamiltonien canonique H_c ne dépend pas des vitesses. Le hamiltonien total sera alors

$$H_T = H_c + \lambda_1 \phi_1 = \frac{1}{2}(p_x)^2 + V(x, y) + \lambda_1(p_y - x)$$

Les équations du mouvement de Hamilton obtenues à partir de ce dernier seront

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p_x & \dot{p}_x &= -\frac{\partial V}{\partial x} + \lambda_1 & \phi_1 &= p_y - x = 0 \\ \dot{y} &= \lambda_1 & \dot{p}_y &= -\frac{\partial V}{\partial y} \end{aligned}$$

Un calcul trivial montre que ces équations se réduisent à la forme

$$\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \dot{y} \quad \dot{x} = -\frac{\partial V}{\partial y}$$

Ces équations ne sont que les équations d'Euler-Lagrange qu'on aurait pu avoir directement à partir du lagrangien du départ, ce qui montre l'équivalence des deux formulations.

2.4 Égalité faible et formulation via les crochets de Poisson

Soit maintenant la fonction $F(q, p)$ définie dans l'espace des phases. A l'aide des équations du mouvement (2.8), on peut déterminer son évolution comme suit :

$$\begin{aligned}\dot{F} &= \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \frac{\partial F}{\partial q_i} \left(\frac{\partial H_c}{\partial p_i} + \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} \right) - \frac{\partial F}{\partial p_i} \left(\frac{\partial H_c}{\partial q_i} + \lambda_m \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} \right) \quad ; \quad \phi_m = 0 \\ &= \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H_c}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H_c}{\partial q_i} \right) + \lambda_m \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial \phi_m}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial \phi_m}{\partial q_i} \right) \quad ; \quad \phi_m = 0\end{aligned}$$

$$\dot{F} = \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} \quad ; \quad \phi_m = 0 \quad (2.9)$$

où $\{ , \}$ désigne les crochets de Poisson, i prend les valeurs de 1 à N et m les valeurs de 1 à M . Donc, il est possible d'avoir les équations dynamiques à l'aide des crochets de Poisson à condition d'utiliser les contraintes $\phi_m = 0$ une fois que les crochets soient calculés. Il est commode de réécrire l'équation précédente sous la forme

$$\dot{F} = (\{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\})|_{\phi_m=0} \quad (2.10)$$

En particulier, les équations de Hamilton (2.8) vont prendre la forme

$$\dot{q}_i = (\{q_i, H_c\} + \lambda_m \{q_i, \phi_m\})|_{\phi_m=0} \quad (2.11)$$

$$\dot{p}_i = (\{p_i, H_c\} + \lambda_m \{p_i, \phi_m\})|_{\phi_m=0} \quad (2.12)$$

où i prend les valeurs de 1 jusqu'à N . Calculons maintenant le crochet $\{F, H_T\}$ où H_T est le hamiltonien total (2.7).

$$\{F, H_T\} = \{F, H_c + \lambda_m \phi_m\} = \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} + \{F, \lambda_m\} \phi_m \quad (2.13)$$

Le dernier crochet est inconnu car on ne dispose pas des expressions des λ_m en fonction des coordonnées et des moments conjugués, mais si on utilise le fait que les $\phi_m = 0$, il va s'annuler automatiquement. Cela veut dire qu'on peut réécrire l'équation dynamique (2.10) sous la forme

$$\begin{aligned}\dot{F} &= (\{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\})|_{\phi_m=0} = (\{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} + \{F, \lambda_m\} \phi_m)|_{\phi_m=0} \\ &= \{F, H_T\}|_{\phi_m=0}\end{aligned} \quad (2.14)$$

Dans tout ce qui suit, on fera une distinction entre les égalités usuelles (fortes) et les égalités faibles. Tandis que les égalités fortes sont valables dans tout l'espace des phases, Les égalités faibles sont valables seulement sur la surface

des contraintes, ça veut dire une fois qu'on a utilisé les contraintes. Autrement dit, si on utilise le symbole \approx pour désigner les égalités faibles, alors pour deux fonctions $F(q, p)$ et $G(q, p)$ de l'espace des phases on peut écrire que⁵

$$F \approx G \Leftrightarrow F|_{\phi_m=0} = G|_{\phi_m=0} \Leftrightarrow F - G = \kappa_m \phi_m \quad m = 1 \dots M \quad (2.15)$$

où $\kappa_m \phi_m$ est une combinaison linéaire des contraintes ϕ_m et κ_m des coefficients définis dans l'espace des phases. On remarque qu'on obtient $F = G$ si on pose $\phi_m = 0$. Comme cas particulier, il est clair que

$$\phi_m \approx 0 \quad m = 1 \dots M \quad (2.16)$$

Comme ça, les équations (2.10), (2.11) et (2.12) vont se mettre sous la forme

$$\dot{F} \approx \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} \quad (2.17)$$

$$\dot{q}_i \approx \{q_i, H_c\} + \lambda_m \{q_i, \phi_m\} \quad \dot{p}_i \approx \{p_i, H_c\} + \lambda_m \{p_i, \phi_m\} \quad (2.18)$$

Cela veut dire qu'il faut d'abord calculer les crochets de Poisson ensuite imposer les contraintes pour avoir les bonnes équations du mouvement.

Revenons à la relation (2.14) qui peut s'écrire maintenant sous la forme

$$\{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} \approx \{F, H_T\} \quad (2.19)$$

A l'aide de cette équation et l'équation (2.9) on obtient

$$\dot{F} \approx \{F, H_T\} \quad (2.20)$$

et les équation de Hamilton auront les expressions

$$\dot{q}_i \approx \{q_i, H_T\} \quad ; \quad \dot{p}_i \approx \{p_i, H_T\} \quad i = 1 \dots N \quad (2.21)$$

Pour résumer, on a introduit les égalités faibles afin de se souvenir d'une règle très importante : en présence de contraintes, les crochets de Poisson doivent être tous développés avant d'utiliser ces contraintes.

2.5 Conditions de consistance et contraintes secondaires

On vient de voir dans la section qui précède que l'évolution temporelle d'une grandeur $F(q, p)$ relative à système physique avec contraintes est décrite à l'aide du l'hamiltonien total par l'équation

$$\dot{F} \approx \{F, H_T\} \approx \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} \quad (2.22)$$

⁵Pour la démonstration de la dernière égalité, voir la référence [2] page 8

Si on remplace $F(q, p)$ par les contraintes primaires $\phi_{m'}(q, p)$, $m' = 1 \dots M$ on aura

$$\dot{\phi}_{m'} \approx \{\phi_{m'}, H_c\} + \lambda_m \{\phi_{m'}, \phi_m\} \quad m' = 1 \dots M$$

Mais comme les contraintes sont conservées dans le temps ($\phi_{m'} \approx 0 \Rightarrow \dot{\phi}_{m'} \approx \frac{d\phi_{m'}}{dt} \approx 0$), l'équation précédente va se réduire à la forme

$$\{\phi_{m'}, H_c\} + \lambda_m \{\phi_{m'}, \phi_m\} \approx 0 \quad m' = 1 \dots M \quad (2.23)$$

Ces conditions de consistance doivent être vérifiées par toutes les contraintes primaires, ce qui va nous permettre d'avoir plus d'informations sur les multiplicateurs de Dirac λ_m , $m = 1 \dots M$. L'étude de ces conditions de consistance va nous mener vers l'une de ces quatre situations :

2.5.1 Le premier cas

Les conditions de consistance vont nous conduire à une équation fondamentalement fautive telle que $1 = 0$. Cela veut dire que notre lagrangien du départ est inconsistant et qu'il faut le revoir. Par exemple le lagrangien $L = x - \dot{x}$ est inconsistant car l'équation d'Euler-Lagrange issue de ce dernier est $\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \implies 1 = 0$. Essayons de voir ça avec les conditions de consistance. Nous sommes en présence d'une seule contrainte primaire $\phi_1 = p_x + 1 \approx 0$ et le hamiltonien canonique $H_c = -x$. La condition de consistance est

$$\dot{\phi}_1 = 0 \Rightarrow \{\phi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow 1 \approx 0$$

On voit bien qu'il y a une anomalie et il ne faut pas essayer d'aller plus loin avant de modifier notre lagrangien.

2.5.2 Le deuxième cas

Il se peut que les conditions de consistance se réduisent à des équations qui sont identiquement vraies telles que $0 \approx 0$. Dans ce cas la procédure se termine ici. Pour le voir, soit par exemple le $L = 2xy\dot{x} + x^2\dot{y}$ qui présente deux contraintes primaires $\phi_1 = p_x - 2xy \approx 0$ et $\phi_2 = p_y - x^2 \approx 0$ qui résultent de la définition des moments conjugués. Le hamiltonien canonique est

$$H_c = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - 2xy\dot{x} - x^2\dot{y} = \dot{x} \underbrace{(p_x - 2xy)}_{=\phi_1} + \dot{y} \underbrace{(p_y - x^2)}_{=\phi_2} = 0$$

Donc le hamiltonien total aura l'expression

$$H_T = \lambda_1 (2xy - p_x) + \lambda_2 (x^2 - p_y)$$

Appliquons les conditions de consistance pour les deux contraintes ϕ_1 et ϕ_2 .

$$\begin{aligned}\dot{\phi}_1 \approx 0 &\Rightarrow \{\phi_1, H_T\} \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} + \lambda_2 \{\phi_1, \phi_2\} \approx 0 \\ &\Rightarrow \lambda_2 \{2xy - p_x, x^2 - p_y\} \approx 0 \Rightarrow \lambda_2 (2x - 2x) \approx 0 \Rightarrow 0 \approx 0\end{aligned}$$

De même

$$\dot{\phi}_2 \approx 0 \Rightarrow \{\phi_2, H_T\} \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \{\phi_2, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \{2xy - p_x, x^2 - p_y\} \approx 0 \Rightarrow 0 \approx 0$$

Dans cette situation les multiplicateurs λ_1 et λ_2 sont quelconques et ne peuvent pas être fixés par les conditions de consistance.

2.5.3 Le troisième cas

Contrairement au cas précédent, les conditions de consistance vont fixer les valeurs de multiplicateurs $\lambda_m, m = 1 \dots M$ et notre procédure s'arrête aussi. Prenons par exemple le lagrangien $L = -y\dot{x} + x\dot{y} - xy$ qui conduit aux contraintes primaires $\phi_1 = p_x + y \approx 0$ et $\phi_2 = p_y - x \approx 0$. Le hamiltonien canonique dans ce cas est

$$H_c = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + y\dot{x} - x\dot{y} + xy = \dot{x} \underbrace{(p_x + y)}_{=\phi_1} + \dot{y} \underbrace{(p_y - x)}_{=\phi_2} + xy = xy$$

Les conditions $\dot{\phi}_1 \approx 0$ et $\dot{\phi}_2 \approx 0$ impliquent

$$\{\phi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} + \lambda_2 \{\phi_1, \phi_2\} \approx 0 \Rightarrow -y + 2\lambda_2 \approx 0 \Rightarrow \lambda_2 \approx \frac{y}{2}$$

$$\{\phi_2, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_2, \phi_1\} + \lambda_2 \{\phi_2, \phi_2\} \approx 0 \Rightarrow -x - 2\lambda_1 \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \approx -\frac{x}{2}$$

Il est maintenant possible d'utiliser les contraintes $p_x + y = 0$ et $p_y - x = 0$, pour écrire $\lambda_2 \approx -\frac{p_x}{2}$ et $\lambda_1 \approx -\frac{p_y}{2}$, car on a terminé avec les crochets de Poisson.

2.5.4 Le quatrième cas

Les conditions de consistance peuvent donner naissance à des nouvelles relations $\chi_k(q, p) \approx 0, k = 1 \dots K_1$ entre les moments conjugués et des positions indépendamment des multiplicateurs λ_m et des contraintes primaires. Ces dernières sont appelées les contraintes secondaires. Elles diffèrent des contraintes primaires par le fait que ces dernières sont des conséquences de la définition des moments conjugués alors les contraintes secondaires résultent des conditions dynamiques de consistance. Les contraintes $\chi_k(q, p) \approx 0$ doivent être aussi préservées dans le temps $\dot{\chi}_k(q, p) \approx 0$. En utilisant l'équation (2.22), on conclut

que les contraintes secondaires doivent satisfaire à leur tour les conditions de consistance suivantes :

$$\{\chi_k, H_c\} + \lambda_m \{\chi_k, \phi_m\} \approx 0 \quad k = 1 \dots K_1 \quad (2.24)$$

Ces conditions vont s'ajouter aux conditions (2.23) pour constituer les nouvelles conditions de consistance dont l'étude va aboutir sur l'un des quatre cas précédents. Ce qui veut dire qu'on peut tomber sur de nouvelles contraintes secondaires (quatrième cas) qui vont donner lieu à de nouvelles conditions de consistance qu'il faut prendre en considération. On va continuer comme ça jusqu'à à l'épuisement de toutes les conditions de consistance et le résultat final sera la détermination de toutes les contraintes secondaires avec un certain nombre de multiplicateurs λ_m . Ce processus est appelé l'algorithme de Bergmann-Dirac.

Exemple 1 Si on choisit par exemple un lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + x\dot{y} + z^2\dot{z} - xy$ qui dépend de trois variables de positions (x, y, z) et les vitesses $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$. La définition des moments conjugués va s'accompagner de deux contraintes primaires $\phi_1 = x - p_y \approx 0$ et $\phi_2 = z^2 - p_z \approx 0$. Avec ces contraintes, le hamiltonien canonique sera

$$H_c = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - L = p_x^2 + \dot{y}x + \dot{z}z^2 - \frac{1}{2}p_x^2 - x\dot{y} - z^2\dot{z} + xy = \frac{p_x^2}{2} + xy$$

D'où le hamiltonien total

$$H_T = H_c + \lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2 = \frac{p_x^2}{2} + xy + \lambda_1(x - p_y) + \lambda_2(z^2 - p_z)$$

Utilisons maintenant les conditions de consistance.

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_1 \approx 0 &\Rightarrow \{\phi_1, H_c\} + \lambda_2\{\phi_1, \phi_2\} \approx 0 \Rightarrow p_x + x \approx 0 \\ \dot{\phi}_2 \approx 0 &\Rightarrow \{\phi_2, H_c\} + \lambda_1\{\phi_2, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow 0 \approx 0 \end{aligned}$$

On voit que la première condition donne naissance à une contrainte secondaire $\chi_1 = p_x + x \approx 0$ qui doit vérifier la condition

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_1 \approx 0 &\Rightarrow \{\chi_1, H_c\} + \lambda_1\{\chi_1, \phi_1\} + \lambda_2\{\chi_1, \phi_2\} \approx 0 \\ &\Rightarrow -y + p_x + (-1)\lambda_1 \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \approx -y + p_x \end{aligned}$$

La procédure se termine ici car il n'y a pas de nouvelles contraintes. On a pu fixer $\lambda_1 \approx -y + p_x$ mais λ_2 peut prendre n'importe quelle valeur et les conditions de consistance resteront satisfaites. La solution générale s'écrit alors

$$\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -y + p_x \\ v \end{bmatrix} \approx \underbrace{\begin{bmatrix} -y + p_x \\ 0 \end{bmatrix}}_{=\Lambda} + v \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{=V}$$

où v est une fonction quelconque des coordonnées et des moments conjugués qui peut dépendre aussi du temps ($v = v(q, p, t)$).

Exemple 2 Soit le lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\dot{y}^2 - z(y - x)$ qui dépend de trois variables de positions (x, y, z) et les vitesses $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$. La définition des moments conjugués va nous donner une contraintes primaire $\phi_1 = p_z \approx 0$. Le hamiltonien canonique est

$$H_c = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - L = p_x^2 + p_y^2 + \dot{z} \underbrace{p_z}_{\approx 0} - \frac{1}{2}p_x^2 - \frac{1}{2}p_y^2 + z(y - x)$$

$$H_c = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{1}{2}p_y^2 + z(y - x)$$

D'où le hamiltonien total

$$H_T = H_c + \lambda_1 \phi_1 = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{1}{2}p_y^2 + z(y - x) + \lambda_1 p_z$$

Utilisons maintenant la condition de consistance

$$\dot{\phi}_1 \approx 0 \Rightarrow \{\phi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow -y + x \approx 0$$

On voit apparaître une contrainte secondaire $\chi_1 = -y + x \approx 0$ qui doit vérifier la condition de consistance

$$\dot{\chi}_1 \approx 0 \Rightarrow \{\chi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow p_x - p_y \approx 0$$

On a maintenant une autre contrainte secondaire $\chi_2 = p_x - p_y \approx 0$ qui doit satisfaire la relation

$$\dot{\chi}_2 \approx 0 \Rightarrow \{\chi_2, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_2, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow z \approx 0$$

On vient d'obtenir une troisième contrainte secondaire $\chi_3 = z \approx 0$, d'où la condition de consistance

$$\dot{\chi}_3 \approx 0 \Rightarrow \{\chi_3, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_3, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow \lambda_1 \approx 0$$

La procédure ce termine ici car il n'y a pas de nouvelles contraintes et $\lambda_1 \approx 0$.

Exemple 3 Soit une particule de masse m se déplaçant à deux dimensions en présence du champ gravitationnel g dont le lagrangien $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\dot{y}^2}{2} - mgy$. Supposons que notre particule est restreinte à ne pas quitter le cercle d'équation $x^2 + y^2 = R^2$. Essayons de la décrire dans la formulation hamiltonienne. L'équation du cercle sera une contrainte primaire $\phi_1 = x^2 + y^2 - R^2 \approx 0$ et le hamiltonien canonique est le hamiltonien obtenu à partir du lagrangien du départ. Autrement dit $H_c = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + mgy$, d'où hamiltonien total sera alors

$$H_T = H_c + \lambda_1 \phi_1 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + mgy + \lambda_1 (x^2 + y^2 - R^2)$$

La condition de consistance sur ϕ_1 s'écrit

$$\dot{\phi}_1 \approx 0 \Rightarrow \{\phi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow xp_x + yp_y \approx 0$$

On a donc une contrainte secondaire $\chi_1 = xp_x + yp_y \approx 0$ qui doit vérifier la condition

$$\dot{\chi}_1 \approx 0 \Rightarrow \{\chi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow \frac{p_x^2}{m} + \frac{p_y^2}{m} - mgy - 2\lambda_1(x^2 + y^2) \approx 0$$

$$\lambda_1 \approx \frac{-1}{2(x^2 + y^2)} \left(\frac{p_x^2}{m} + \frac{p_y^2}{m} - mgy \right)$$

Mais $x^2 + y^2 = R^2$, d'où $\lambda_1 \approx \frac{-1}{2R^2} \left(\frac{p_x^2}{m} + \frac{p_y^2}{m} - mgy \right)$. L'algorithme de Dirac Bergmann se termine ici avec la détermination du multiplicateur λ_1 .

2.6 Solution générale de l'algorithme de Dirac-Bergmann

Dans le cas général, l'algorithme de Dirac-Bergmann se solde par la détermination de toutes les contraintes secondaires $\chi_k(q, p) \approx 0, k = 1 \dots K$, en plus des M contraintes primaires $\phi_m \approx 0$ à condition que la lagrangien du départ soit consistant. Pour une raison de commodité, et puisque ces contraintes secondaires seront traitées presque de la même manière que les contraintes primaires, il convient de les noter

$$\phi_k \approx 0 \quad k = M + 1 \dots K + M \quad (2.25)$$

où K est le nombre des contraintes secondaires. Dans ce cas, l'ensemble de toutes les contraintes sera désigné par

$$\phi_j \approx 0 \quad j = 1 \dots J \quad (2.26)$$

où $J = K + M$. Ces contraintes vont définir ces conditions de consistance

$$\{\phi_j, H_c\} + \lambda_m \{\phi_j, \phi_m\} \approx 0 \quad (2.27)$$

Ici on somme sur m de 1 à M tandis que j prend les valeurs de 1 jusqu'à J . On obtient ainsi un système de J équations algébriques linéaires non homogènes avec M inconnues λ_m . Sa solution la plus générale est de la forme

$$\lambda_m = \Lambda_m(p, q) + V_m(p, q) \quad (2.28)$$

où Λ_m est une solution particulière et V_m la solution générale du système homogène

$$V_m \{ \phi_j, \phi_m \} = 0 \quad (2.29)$$

En principe, $V_m = v_a V_{am}(p, q)$ où $V_a(p, q)$, $a = 1 \dots A$ représentent A vecteurs avec M composantes indépendants et v_a des coefficients arbitraires qui peuvent dépendre des coordonnées, des moments conjugués et du temps comme le montre le premier exemple de la sous-section (2.5.4). Donc la solution générale du système (2.27) sera la suivante

$$\lambda_m = \Lambda_m(p, q) + v_a V_{am}(p, q) \quad (2.30)$$

On peut alors réécrire le hamiltonien total (2.7) en utilisant (2.30) sous la forme

$$H_T = H_c + \Lambda_m \phi_m + v_a V_{am} \phi_m = H' + v_a \phi_a \quad (2.31)$$

où

$$H' = H_c + \Lambda_m \phi_m \quad \phi_a = V_{am} \phi_m \quad m = 1 \dots M ; a = 1 \dots A \quad (2.32)$$

Les $\phi_a = V_{am} \phi_m$, $a = 1 \dots A$ sont des combinaisons linéaires de contraintes primaires ϕ_m , ce qui veut dire qu'elles sont aussi des contraintes primaires. Les équations du mouvement peuvent s'écrire alors

$$\dot{q}_i \approx \{q_i, H_T\} \approx \{q_i, H'\} + v_a \{q_i, \phi_a\} \quad i = 1 \dots N \quad (2.33)$$

$$\dot{p}_i \approx \{p_i, H_T\} \approx \{p_i, H'\} + v_a \{p_i, \phi_a\} \quad i = 1 \dots N \quad (2.34)$$

D'une manière générale, la variation dans le temps de toute fonction $F(q, p)$ définie dans l'espace des phases va obéir à l'équation

$$\dot{F} \approx \{F, H_T\} \approx \{F, H'\} + v_a \{F, \phi_a\} \quad (2.35)$$

Il faut distinguer deux cas : le premier, c'est quand les vecteurs $V_a(p, q)$, $a = 1 \dots A$ sont nuls, ce qui veut dire que les $\phi_a = 0$ et les équations du mouvement seront bien déterminées. Le deuxième correspond au cas contraire, et les équations du mouvement vont dépendre de coefficients arbitraires v_a , $a = 1 \dots A$. Dans la suite nous verrons que le premier cas va nous permettre de définir les crochets de Dirac directement, alors que le deuxième cas signifie qu'il y a une symétrie de jauge et qu'il faut des conditions supplémentaires pour fixer cette jauge afin de définir aussi les crochets de Dirac.

Chapitre 3

Contraintes de Première et de Deuxième Classe et Crochet de Dirac

Dans ce qui suit, nous allons introduire une autre classification des contraintes en plus de la classification en contraintes primaires et secondaires faite dans le chapitre précédent. Il s'agit de diviser ces contraintes en deux ensembles : celles de la première classe et celles de la deuxième classe et de discuter leurs propriétés. Dans le traitement des contraintes de première classe, nous allons montrer qu'elles ont un lien étroit avec les théories de jauge. Ensuite, on va introduire le crochet de Dirac en éliminant les contraintes de deuxième classe qui va remplacer le crochet de Poisson en présence de contraintes. L'objectif ultime sera de donner une version quantique des systèmes hamiltoniens avec contraintes.

3.1 Contraintes de première et deuxième classe

On a vu dans le chapitre précédent que l'équation (2.22) régit la variation dans le temps d'une grandeur $F = F(q, p)$ dépendant des coordonnées généralisées $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ et des moments conjugués $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ dans le formalisme hamiltonien. Autrement dit,

$$\dot{F} \approx \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \phi_m\} \quad m = 1 \dots M \quad (3.1)$$

Dans le cas où $F = \phi_j, j = 1 \dots J$ est une contrainte primaire ou secondaire qui se conserve dans le temps ($\dot{\phi}_j \approx 0$), l'équation précédente va nous donner les conditions de consistance

$$\{\phi_j, H_c\} + \lambda_m \{\phi_j, \phi_m\} \approx 0 \quad m = 1 \dots M \quad j = 1 \dots J \quad (3.2)$$

où $J = M + K$ sachant que M est le nombre de contraintes primaires et K celui des contraintes secondaires.

A ce stade remarquons que si pour un certain indice j le crochet $\{\phi_j, \phi_m\} \approx 0$, l'équation ci-dessus se réduit à la forme simple

$$\{\phi_j, H_c\} \approx 0 \quad (3.3)$$

Dans cette équation on a perdu complètement tous les multiplicateurs λ_m , ce qui veut dire qu'elle est vérifiée quelque soient ces derniers. En d'autres termes, cette équation n'impose pas des conditions sur ces multiplicateurs. Pour cette raison on fait une distinction fondamentale entre les contraintes dites de première classe et celles dites de seconde classe. Selon Dirac, on dit qu'une fonction $F(q, p)$ est de première classe si son crochet de Poisson avec chacune des contraintes $\phi_j, j = 1 \dots J$ est nul sur la surface des contraintes, c'est-à-dire

$$\{F, \phi_j\} \approx 0 \Leftrightarrow \{F, \phi_j\} = \kappa_{jj'} \phi_{j'} \quad (3.4)$$

où $\kappa_{jj'} = \kappa_{jj'}(q, p)$ sont des fonctions de q et p . Si la fonction $F(q, p)$ n'est pas de première classe, elle est dite de deuxième classe automatiquement. Le hamiltonien total H_T par exemple est de première classe par construction car les relations de consistance (3.2) s'écrivent aussi sous la forme

$$\{\phi_j, H_T\} \approx 0 \quad \forall j = 1 \dots J \quad (3.5)$$

Dans un cas particulier, une contrainte $\phi_{j'}$ (primaire ou secondaire) est appelée contrainte de première classe si son crochet de Poisson avec les autres contraintes est faiblement égal à zéro

$$\{\phi_{j'}, \phi_j\} \approx 0 \quad \forall j = 1 \dots J \quad (3.6)$$

Il faut savoir qu'une contrainte primaire peut être de deuxième classe comme une contrainte secondaire peut être de première classe; les deux classifications n'ont rien à avoir l'une avec l'autre.

A ce stade, on va essayer de démontrer que le crochet de Poisson de deux quantités $F(q, p)$ et $G(q, p)$ de première classe est une quantité de première classe en utilisant la règle de Leibniz et l'identité de Jacobi. Les crochets de Poisson des fonctions F et G avec toutes les contraintes $\phi_j, j = 1 \dots J$ sont des combinaisons linéaires de ces contraintes.

$$\begin{aligned} \{F, \phi_j\} \approx 0 &\Leftrightarrow \{F, \phi_j\} = f_{jj'} \phi_{j'} \\ \{G, \phi_j\} \approx 0 &\Leftrightarrow \{G, \phi_j\} = g_{jj'} \phi_{j'} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Essayons de développer le crochet $\{\{F, G\}, \phi_j\}$ à l'aide de ces relations.

$$\begin{aligned}
 \{\{F, G\}, \phi_j\} &= -\{\{\phi_j, F\}, G\} - \{\{G, \phi_j\}, F\} \\
 &= \{\{F, \phi_j\}, G\} - \{\{G, \phi_j\}, F\} = \{f_{jj'}\phi_{j'}, G\} - \{g_{jj'}\phi_{j'}, F\} \\
 &= f_{jj'}\{\phi_{j'}, G\} + \{f_{jj'}, G\}\phi_{j'} - g_{jj'}\{\phi_{j'}, F\} - \{g_{jj'}, F\}\phi_{j'} \\
 &= -f_{jj'}g_{j'j''}\phi_{j''} + \{f_{jj'}, G\}\phi_{j'} + g_{jj'}f_{j'j''}\phi_{j''} - \{g_{jj'}, F\}\phi_{j'} \approx 0
 \end{aligned}$$

Exemple Dans le cas du lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + x\dot{y} + z^2\dot{z} - xy$, Nous avons deux contraintes primaires $\phi_1 = x - p_y \approx 0$ et $\phi_2 = z^2 - p_z$ et une contrainte secondaire $\phi_3 = x + p_x$. La contrainte ϕ_2 est de première classe car

$$\{\phi_2, \phi_1\} = \{z^2 - p_z, x - p_y\} = 0 \approx 0 ; \{\phi_2, \phi_3\} = \{z^2 - p_z, x + p_x\} = 0 \approx 0$$

Par contre

$$\{\phi_1, \phi_3\} = \{x - p_y, x + p_x\} = 1 \not\approx 0$$

ce qui veut dire que les contraintes ϕ_1 et ϕ_3 sont de deuxième classe.

Avant d'entamer la section suivante, il très utile de vérifier que le hamiltonien H' et les contraintes primaires $\phi_a, a = 1...A$ donnés par l'équation (2.32) sont de première classe. En effet, d'après les relations (2.28) et (2.30) du chapitre précédent $\{H_c, \phi_j\} + \Lambda_m \{\phi_m, \phi_j\} \approx 0$ et $V_{am} \{\phi_m, \phi_j\} \approx 0$, ce qui va nous permettre de faire les démonstrations suivantes :

$$\begin{aligned}
 \{H', \phi_j\} &= \{H_c + \Lambda_m \phi_m, \phi_j\} = \{H_c, \phi_j\} + \{\Lambda_m \phi_m, \phi_j\} \\
 &= \{H_c, \phi_j\} + \Lambda_m \{\phi_m, \phi_j\} + \{\Lambda_m, \phi_j\} \phi_m \\
 &\approx 0 + \{\Lambda_m, \phi_j\} \phi_m \approx 0 \quad \forall j = 1...J \\
 \\
 \{\phi_a, \phi_j\} &= \{V_{am} \phi_m, \phi_j\} = V_{am} \{\phi_m, \phi_j\} + \{V_{am}, \phi_j\} \phi_m \\
 &\approx 0 + \{V_{am}, \phi_j\} \phi_m \approx 0 \quad \forall j = 1...J
 \end{aligned}$$

3.2 Contraintes de première classe et symétrie de jauge

On a déjà vu d'après (2.36) que, d'une manière générale, l'évolution d'une grandeur $F = F(q, p)$, définie dans l'espace des phases, est déterminée par l'équation

$$\dot{F} \approx \{F, H'\} + v_a \{F, \phi_a\} \quad (3.8)$$

où les $v_a, a = 1...A$ sont des coefficients arbitraires qui peuvent dépendre du temps et les $\phi_a, a = 1...A$ sont des contraintes de première classe comme on vient de le démontrer dans la section précédente. Quand toutes les contraintes sont de deuxième classe, cette équation se réduit à la forme $\dot{F} \approx \{F, H'\}$. Supposons que

nous connaissons les conditions initiales q_0 et p_0 à l'instant $t_0 = 0$, ce qui veut dire que $F_0 = F(q_0, p_0)$. A un instant ultérieur $t_0 + \delta t$ très proche du premier ($\delta t \simeq 0$), Notre grandeur F sera

$$\begin{aligned} F &= F_0 + \dot{F} \delta t \\ &= F_0 + \{F, H_T\} \delta t \\ &= F_0 + \{F, H'\} \delta t + \{F, v_a \phi_a\} \delta t \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$F = F_0 + \{F, H'\} \delta t + v_a \{F, \phi_a\} \delta t \quad (3.10)$$

Comme les coefficients $v_a, a = 1 \dots A$ sont complètement arbitraires, F ne sera pas déterminée d'une façon unique. Autrement dit, si on choisit d'autres coefficients $v'_a, a = 1 \dots A$ on aura

$$F' = F_0 + \{F, H'\} \delta t + v'_a \{F, \phi_a\} \delta t \quad (3.11)$$

Ce qui nous donne la différence

$$\delta F = F' - F = \delta t (v'_a - v_a) \{F, \phi_a\} \quad (3.12)$$

Posons $\varepsilon_a(t) = \delta t (v'_a - v_a), a = 1 \dots A$ pour avoir la forme

$$\delta F = F' - F \Rightarrow \delta F = \varepsilon_a(t) \{F, \phi_a\} \quad (3.13)$$

Les $\varepsilon_a(t), a = 1 \dots A$ sont des fonctions infinitésimales car δt est infinitésimal et arbitraires car v'_a et v_a le sont aussi. Tous ça veut dire que la connaissance des conditions initiales n'est pas suffisante pour déterminer l'état ultérieur de notre système à cause des coefficients $v_a, a = 1 \dots A$ complètement arbitraires. Cela veut dire, que la solution générale des équations du mouvement contient des fonctions arbitraires ce qui est une propriété fondamentale des théories de jauge. En plus d'après (3.13), la transformation de jauge infinitésimale est générée par les contraintes $\phi_a, a = 1 \dots A$ qui sont des contraintes primaires de première classe. Particulièrement, la transformation des variables fondamentales est

$$\delta q_i = \varepsilon_a(t) \frac{\partial \phi_a}{\partial p^i} \quad ; \quad \delta p_i = -\varepsilon_a(t) \frac{\partial \phi_a}{\partial q^i} \quad i = 1 \dots N \quad (3.14)$$

On vient de voir que les contraintes primaires de première classe génèrent des transformations de jauge. Dirac va plus loin en postulant que même les contraintes secondaires de première classe génèrent elles aussi des transformations de jauge qui laissent invariant l'état du système étudié¹.

¹Pour plus d'analyse et de discussion voir les référence [1] et [2] page 21 et page 17 respectivement.

Exemple 1 Le lagrangien $L = \frac{(y\dot{x} + x\dot{y})^2}{2}$ a une seule contrainte primaire $\phi_1 = xp_x - yp_y$ car

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = y(y\dot{x} + x\dot{y}) \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = x(y\dot{x} + x\dot{y}) \end{aligned} \Rightarrow xp_x - yp_y = 0 \quad (\text{I})$$

En en déduit que $p_y = \frac{xp_x}{y}$, ce qui implique

$$H_c = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = \dot{x}p_x + \dot{y}\frac{xp_x}{y} - \frac{(y\dot{x} + x\dot{y})^2}{2} = (y\dot{x} + \dot{y}x)\frac{p_x}{y} - \frac{(y\dot{x} + x\dot{y})^2}{2}$$

Mais d'après l'équation (I), $p_x = y(y\dot{x} + x\dot{y}) \Rightarrow \frac{p_x}{y} = (y\dot{x} + x\dot{y})$, d'où

$$H_c = \frac{p_x}{y} \frac{p_x}{y} - \frac{(p_x/y)^2}{2} = \frac{p_x^2}{2y^2}$$

Le hamiltonien total dans ce cas sera

$$H_T = H_c + \lambda_1 \phi_1 = \frac{p_x^2}{2y^2} + \lambda_1 (xp_x - yp_y)$$

L'évolution temporelle de la contrainte $\phi_1 = xp_x - yp_y$ est régie par l'équation

$$\dot{\phi}_1 \approx 0 \Rightarrow \{\phi_1, H_T\} \approx 0 \Rightarrow \{\phi_1, H_c\} \approx 0 \Rightarrow \left\{ xp_x - yp_y, \frac{p_x^2}{2y^2} \right\} \approx 0 \Rightarrow 0 \approx 0$$

Donc $\phi_1 = xp_x - yp_y$ est la seule contrainte que possède notre système et elle est automatiquement de première classe car $\{\phi_1, \phi_1\} = 0 \approx 0$. D'après Dirac, elle va générer une transformation de jauge infinitésimale à l'aide de la relation

$$\delta F = \varepsilon_1(t) \{F, \phi_1\} = \varepsilon_1(t) \{F, xp_x - yp_y\}$$

où F est une fonction définie dans l'espace des phases et $\varepsilon_1(t)$ une fonction arbitraire qui dépend du temps. En cas particulier,

$$\delta x = \varepsilon_1(t)x \quad \delta y = -\varepsilon_1(t)y \quad \delta p_x = -\varepsilon_1(t)p_x \quad \delta p_y = \varepsilon_1(t)p_y$$

On en déduit

$$y\delta x + x\delta y = 0 \Rightarrow \dot{y}\delta x + y\delta\dot{x} + \dot{x}\delta y + x\delta\dot{y} = 0 \quad (\text{II})$$

Sous cette transformation, le lagrangien du départ $L = \frac{(y\dot{x} + x\dot{y})^2}{2}$ va subir une transformation

$$\delta L = (y\dot{x} + x\dot{y})(\dot{y}\delta x + y\delta\dot{x} + \dot{x}\delta y + x\delta\dot{y})$$

En utilisant (II), on obtient

$$\delta L = 0$$

Donc le lagrangien reste invariant sous la transformation générée par la contrainte $\phi_1 = xp_x - yp_y$.

Exemple 2 Soit le lagrangien singulier $L = (\dot{x} - z)(\dot{y} - x) = \dot{x}\dot{y} - x\dot{x} - z\dot{y} + xz$. Par définition, les moments conjugués sont

$$p_x = \dot{y} - x \quad p_y = \dot{x} - z \quad p_z = 0$$

On voit bien apparaître une contrainte primaire $\phi_1 = p_z \approx 0$. Sachant qu'à partir des relations précédentes $\dot{y} = p_x + x$ et $\dot{x} = p_y + z$, le hamiltonien canonique sera

$$\begin{aligned} H_c &= \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \underbrace{\dot{z} p_z}_{\approx 0} - L = (p_y + z)p_x + (p_x + x)p_y - p_y p_x \\ H_c &= p_x p_y + z p_x + x p_y \end{aligned}$$

La condition de consistance pour la contrainte primaire $\phi_1 = p_z$ est

$$\{\phi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow p_x \approx 0$$

La condition de consistance pour la contrainte secondaire $\chi_1 = p_x$ est

$$\{\chi_1, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_1, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow p_y \approx 0$$

La condition de consistance pour la deuxième contrainte secondaire $\chi_2 = p_y$ est

$$\{\chi_2, H_c\} + \lambda_1 \{\chi_2, \phi_1\} \approx 0 \Rightarrow 0 \approx 0$$

et le processus se termine ici. Ces contraintes sont toutes de première classe car

$$\{\chi_1, \phi_1\} = \{\chi_2, \phi_1\} = \{\chi_1, \chi_2\} = 0$$

On va poser $\gamma_1 = \phi_1$, $\gamma_2 = \chi_1$ et $\gamma_3 = \chi_2$. D'après Dirac, ces contraintes vont générer la transformation de jauge

$$\delta F = \varepsilon_1(t) \{F, \gamma_1\} + \varepsilon_2(t) \{F, \gamma_2\} + \varepsilon_3(t) \{F, \gamma_3\}$$

où F est une fonction définie dans l'espace des phases et $\varepsilon_1(t)$, $\varepsilon_2(t)$ et $\varepsilon_3(t)$ des fonctions arbitraires qui dépendent du temps. En particulier,

$$\delta x = \varepsilon_2(t) \quad \delta y = \varepsilon_3(t) \quad \delta z = \varepsilon_1(t) \quad \delta p_x = 0 \quad \delta p_y = 0 \quad \delta p_z = 0$$

Mais $p_x = \dot{y} - x$, $p_y = \dot{x} - z$ et $p_z = 0$, d'où

$$\delta p_x = \delta \dot{y} - \delta x \quad \delta p_y = \delta \dot{x} - \delta z \quad \delta p_z = 0$$

En utilisant les relations précédentes, on obtient

$$0 = \dot{\varepsilon}_3(t) - \varepsilon_2(t) \quad 0 = \dot{\varepsilon}_2(t) - \varepsilon_1(t) \quad 0 = 0 \Rightarrow \begin{cases} \varepsilon_1(t) = \ddot{\varepsilon}_3(t) \\ \varepsilon_2(t) = \dot{\varepsilon}_3(t) \end{cases}$$

Finalement, on aura

$$\delta x = \dot{\varepsilon}_3(t) \quad \delta y = \varepsilon_3(t) \quad \delta z = \ddot{\varepsilon}_3(t)$$

Le lagrangien $L = (\dot{x} - z)(\dot{y} - x)$ va subir la variation

$$\begin{aligned} \delta L &= (\delta \dot{x} - \delta z)(\dot{y} - x) + (\dot{x} - z)(\delta \dot{y} - \delta x) \\ &= (\ddot{\varepsilon}_3(t) - \ddot{\varepsilon}_3(t))(\dot{y} - x) + (\dot{x} - z)(\dot{\varepsilon}_3(t) - \dot{\varepsilon}_3(t)) = 0 \end{aligned}$$

Donc notre lagrangien est un invariant de jauge sous la transformation générée par les contraintes de première classe (primaires et secondaires).

3.3 Contraintes de deuxième classe et crochet de Dirac

On a vu dans la section précédente que les contraintes de première classe génèrent des transformations de jauge. Dans celle-ci, on va supposer que toutes les contraintes de notre système (primaire et secondaires) sont de deuxième classe et on va les noter $\xi_r, r = 1 \dots R$, où les $\xi_m, m = 1 \dots M$ dénotent les contraintes primaires et les $\xi_k, k = M + 1 \dots R = J$ désignent les contraintes secondaires. On peut alors écrire les conditions de consistence sous la forme

$$\{\xi_r, H_T\} \approx \{\xi_r, H_c\} + \lambda_m \{\xi_r, \xi_m\} \approx 0 \quad m = 1 \dots M \text{ et } r = 1 \dots R \quad (3.15)$$

Il ne faut pas oublier que seules les contraintes primaires figurent dans l'expression du hamiltonien total H_T .

$$H_T = H_c + \lambda_m \xi_m \quad m = 1 \dots M \quad (3.16)$$

Il est possible d'écrire (3.15) sous forme matricielle

$$\begin{bmatrix} \{\xi_1, \xi_1\} & \cdots & \cdots & \{\xi_1, \xi_M\} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ \{\xi_R, \xi_1\} & \cdots & \cdots & \{\xi_R, \xi_M\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_M \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -\{\xi_1, H_c\} \\ -\{\xi_2, H_c\} \\ \vdots \\ \vdots \\ -\{\xi_R, H_c\} \end{bmatrix} \Leftrightarrow \Omega \vec{\lambda} \approx \vec{\eta} \quad (3.17)$$

où

$$\vec{\lambda} = [\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_M]^t \quad \vec{\eta} = [-\{\xi_1, H_c\} \dots -\{\xi_R, H_c\}]^t \quad (3.18)$$

Donc $[\Omega]$ est une matrice avec R lignes et M colonnes. Introduisons la matrice carrée antisymétrique $\Delta = [\{\xi_r, \xi_{r'}\}]_{r,r'=1\dots R}$ qui est construite avec toutes les contraintes de deuxième classe et qui contient la matrice Ω comme bloc.

$$\Delta = \begin{bmatrix} \{\xi_1, \xi_1\} & \cdots & \cdots & \{\xi_1, \xi_M\} & \{\xi_1, \xi_{M+1}\} & \cdots & \{\xi_1, \xi_R\} \\ \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \{\xi_R, \xi_1\} & \cdots & \cdots & \{\xi_R, \xi_M\} & \{\xi_R, \xi_{M+1}\} & \cdots & \{\xi_R, \xi_R\} \end{bmatrix} = [\Omega \ \omega] \quad (3.19)$$

où le bloc ω est une matrice avec R lignes et $R - M$ colonnes. Il est possible de démontrer avec Dirac que le déterminant $\det(\Delta) \not\approx 0 \Rightarrow \det(\Delta) \neq 0$, si toutes les contraintes sont de deuxième classe².

Avant d'aller plus loin, rappelons que le déterminant d'une matrice antisymétrique impaire A est nul. En effet, en utilisant le fait que $A = -A^t$ et $\det(A) = \det(A^t)$ sachant que la transposée de A est notée A^t , on aura

$$\det(A) = \det(-A^t) = (-1)^{2n+1} \det(A^t) = -\det(A) \Rightarrow \det(A) = 0$$

où $2n + 1$ est le nombre de lignes de A qui est impair. Notre matrice Δ est antisymétrique et son déterminant est non nul, donc elle est de dimension paire, ce qui veut dire que le nombre de contraintes de deuxième classe d'un système décrit par un lagrangien singulier est pair. En plus, il est possible de calculer la matrice inverse de Δ notée Δ^{-1} .

$$\Delta_{rr'} \Delta_{r'r''}^{-1} = \delta_{rr''} \quad r, r', r'' = 1\dots R \quad (3.20)$$

Maintenant soit le vecteur colonne

$$\vec{\theta} = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_M \ \underbrace{0 \ 0 \ \dots \ 0}_{R-M \text{ zéro}}]^t = [\vec{\lambda} \ \vec{0}]^t = \begin{bmatrix} \vec{\lambda} \\ \vec{0} \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

Calculons le produit matriciel $\Delta \vec{\theta}$ en faisant la multiplication par bloc comme suit :

$$\Delta \vec{\theta} = \Delta \begin{bmatrix} \vec{\lambda} \\ \vec{0} \end{bmatrix} = [\Omega \ \omega] \begin{bmatrix} \vec{\lambda} \\ \vec{0} \end{bmatrix} = \Omega \vec{\lambda} \quad (3.22)$$

Par comparaison avec (3.17) on conclut que

$$\Delta \vec{\theta} \approx \vec{\eta} \quad (3.23)$$

²Consulter la référence [1] page 39 pour la démonstration.

Comme la matrice Δ est inversible, on en déduit que

$$\vec{\theta} \approx \Delta^{-1} \vec{\eta} \Leftrightarrow \theta_r \approx \Delta_{rr'}^{-1} \eta_{r'} \quad r, r' = 1 \dots R \quad (3.24)$$

Mais $\vec{\theta} = [\vec{\lambda} \ \vec{0}]^t = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_M \ \underbrace{0 \ 0 \ \dots \ 0}_{R-M \text{ zéro}}]^t$, alors l'équation précédente devient

$$\begin{aligned} \theta_m &= \lambda_m \approx \Delta_{mr'}^{-1} \eta_{r'} & m = 1 \dots M, r' = 1 \dots R \\ \theta_r &= 0 \approx \Delta_{rr'}^{-1} \eta_{r'} & r = M + 1 \dots R, r' = 1 \dots R \end{aligned} \quad (3.25)$$

Comme les éléments de matrice Δ sont les crochets $\{\xi_r, \xi_{r'}\}$, $r, r' = 1 \dots R$, on va noter les éléments de sa matrice inverse par $\{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1}$, $r, r' = 1 \dots R$, ce qui veut dire

$$\Delta_{rr'} = \{\xi_r, \xi_{r'}\} \quad \Delta_{rr'}^{-1} = \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \quad r, r' = 1 \dots R \quad (3.26)$$

En utilisant (3.18) et (3.25) on obtient finalement les expressions des multiplicateurs λ_m , $m = 1 \dots M$.

$$\begin{aligned} \lambda_m &\approx -\{\xi_m, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} & m = 1 \dots M, r' = 1 \dots R \\ 0 &\approx -\{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} & r = M + 1 \dots R, r' = 1 \dots R \end{aligned} \quad (3.27)$$

Si on remplace les valeurs des multiplicateurs de Dirac (3.27) dans les conditions de consistance (3.15) on aura

$$\{\xi_r, H_c\} - \{\xi_r, \xi_m\} \{\xi_m, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} \approx 0 \quad m = 1 \dots M \text{ et } r, r' = 1 \dots R \quad (3.28)$$

On a vu que l'équation d'évolution d'une grandeur $F(q, p)$ est $\dot{F} \approx \{F, H_c\} + \lambda_m \{F, \xi_m\}$. Avec les nouvelles valeurs des multiplicateurs λ_m on peut écrire

$$\dot{F} \approx \{F, H_c\} - \{F, \xi_m\} \{\xi_m, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} \quad m = 1 \dots M \text{ et } r' = 1 \dots R \quad (3.29)$$

Mais d'après (3.27), $-\{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} \approx 0$ pour $r = M + 1 \dots R$, ça ne change alors rien d'écrire

$$\dot{F} \approx \{F, H_c\} - \{F, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} \quad r, r' = 1 \dots R \quad (3.30)$$

Si on pose

$$\{F, H_c\} - \{F, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, H_c\} = \{F, H_c\}_D,$$

l'équation précédente va avoir la forme réduite

$$\dot{F} \approx \{F, H_c\}_D \quad (3.31)$$

En effet, $\{F, H_c\}_D$ est le crochet de Dirac de F et H_c . D'une manière générale, le crochet de Dirac de deux fonctions de l'espace des phases est défini par

$$\{f, g\}_D = \{f, g\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, g\} \quad (3.32)$$

Sachant que toutes les contraintes doivent satisfaire les conditions de consistance, autrement dit, les contraintes de deuxième classe $\xi_r, r = 1 \dots R$ vérifient la condition $\{\xi_r, H_T\} \approx 0$, on peut écrire que

$$\begin{aligned} \{F, H_T\}_D &= \{F, H_T\} - \{F, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \underbrace{\{\xi_{r'}, H_T\}}_{\approx 0} \\ \{F, H_T\}_D &\approx \{F, H_T\} \approx \dot{F} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Les équations de Hamilton peuvent alors s'écrire à l'aide de (3.31)

$$\dot{q}_i \approx \{q_i, H_c\}_D ; \quad \dot{p}_i \approx \{p_i, H_c\}_D \quad i = 1 \dots N \quad (3.34)$$

Cette forme nous rappelle les équations de Hamilton écrites à l'aide des crochets de Poisson dans le cas régulier (pas de contraintes).

3.4 Propriétés du crochet de Dirac

On démontre que le crochet de Dirac a les mêmes propriétés que le crochet de Poisson en plus de quelques autres. Autrement dit, si α et β sont deux réels, f, g et h trois fonctions qui dépendent de q et p , alors

$$\begin{aligned} \{f, g\}_D &= -\{g, f\}_D \Rightarrow \{f, f\}_D = 0 && \text{(Antisymétrie)} \\ \{\alpha f + \beta g, h\}_D &= \alpha \{f, h\}_D + \beta \{g, h\}_D && \text{(Linéarité)} \\ \{fg, h\}_D &= f \{g, h\}_D + \{f, h\}_D g && \text{(Règle de Leibniz)} \\ \{f, \{g, h\}\}_D + \{h, \{f, g\}\}_D + \{g, \{h, f\}\}_D &= 0 && \text{(Identité de Jacobi)} \\ \{f, \xi_r\}_D &= 0 && \text{(\xi_r est de deuxième classe)} \\ \{f, \gamma_l\}_D &\approx \{f, \gamma_l\} && \text{(\gamma_l est de première classe)} \end{aligned}$$

Essayons de démontrer quelques unes des propriétés qu'on vient de citer

1* L'antisymétrie

$$\begin{aligned} \{f, g\}_D &= \{f, g\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, g\} \\ &= -\{g, f\} + \{\xi_r, f\} \{\xi_{r'}, \xi_r\}^{-1} \{g, \xi_{r'}\} \\ &= -\{g, f\} + \{g, \xi_{r'}\} \{\xi_{r'}, \xi_r\}^{-1} \{\xi_r, f\} = -\{g, f\}_D \end{aligned}$$

2* La linéarité

$$\begin{aligned} \{\alpha f + \beta g, h\}_D &= \{\alpha f + \beta g, h\} - \{\alpha f + \beta g, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, h\} \\ &= \alpha \{f, h\} + \beta \{g, h\} - (\alpha \{f, \xi_r\} + \beta \{g, \xi_r\}) \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, h\} \\ &= \alpha (\{f, h\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, h\}) \\ &\quad + \beta (\{g, h\} - \{g, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, h\}) \\ &= \alpha \{f, h\}_D + \beta \{g, h\}_D \end{aligned}$$

3* La règle de Leibniz

$$\begin{aligned}
 \{f, gh\}_D &= \{f, gh\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, gh\} \\
 &= \{f, g\} h + g \{f, h\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} (\{\xi_{r'}, g\} h + g \{\xi_{r'}, h\}) \\
 &= \{f, g\} h - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, g\} h + g \{f, h\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} g \{\xi_{r'}, h\} \\
 &= \{f, g\}_D h + g \{f, h\}_D
 \end{aligned}$$

4* La cinquième propriété

$$\begin{aligned}
 \{f, \xi_{r''}\}_D &= \{f, \xi_{r''}\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \{\xi_{r'}, \xi_{r''}\} \\
 &= \{f, \xi_{r''}\} - \{f, \xi_r\} \delta_{rr''} = \{f, \xi_{r''}\} - \{f, \xi_{r''}\} = 0
 \end{aligned}$$

Cette propriété montre que les crochets de Dirac sont compatibles avec les contraintes de deuxième classe $\xi_r, r = 1 \dots R$ et qu'on peut les remplacer directement par zéro dans ces crochets quand elles y figurent.

5* la sixième propriété

$$\{f, \gamma_l\}_D = \{f, \gamma_l\} - \{f, \xi_r\} \{\xi_r, \xi_{r'}\}^{-1} \underbrace{\{\xi_{r'}, \gamma_l\}}_{\approx 0} \approx \{f, \gamma_l\}$$

Cela veut dire que sur la surface des contraintes les crochets de Dirac contenant des contraintes de première classe sont des crochets de Poisson.

Exemple 1 Le lagrangien $L = \frac{\dot{x}^2}{2} + x\dot{y} - xy$ a une contrainte primaire $\phi_1 = p_y - x \approx 0$ et une contrainte secondaire $\phi_2 = p_x + x \approx 0$. Comme $\{\phi_1, \phi_2\} = -1 \neq 0$, ces contraintes sont de deuxième classe qu'on va noter $\xi_1 = \phi_1$, et $\xi_2 = \phi_2$. La matrice des contraintes sera alors

$$M = \begin{bmatrix} 0 & \{\xi_1, \xi_2\} \\ \{\xi_2, \xi_1\} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

D'où

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & \{\xi_1, \xi_2\}^{-1} \\ \{\xi_2, \xi_1\}^{-1} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Le crochet de Dirac de deux fonction $f(q, p)$ et $g(q, p)$ sera alors

$$\begin{aligned}
 \{f, g\}_D &= \{f, g\} - \{f, \xi_1\} M_{12}^{-1} \{\xi_2, g\} - \{f, \xi_2\} M_{21}^{-1} \{\xi_1, g\} \\
 \{f, g\}_D &= \{f, g\} - \{f, p_y - x\} \{p_x + x, g\} + \{f, p_x + x\} \{p_y - x, g\}
 \end{aligned}$$

En particulier, les crochets relatifs aux variables fondamentales sont

$$\begin{aligned}
 \{x, y\}_D &= \{x, y\} - \{x, p_y - x\} \{p_x + x, y\} + \{x, p_x + x\} \{p_y - x, y\} = -1 \\
 \{x, p_x\}_D &= \{x, p_x\} - \{x, p_y - x\} \{p_x + x, p_x\} + \{x, p_x + x\} \{p_y - x, p_x\} = 0 \\
 \{x, p_y\}_D &= \{x, p_y\} - \{x, p_y - x\} \{p_x + x, p_y\} + \{x, p_x + x\} \{p_y - x, p_y\} = 0 \\
 \{y, p_x\}_D &= \{y, p_x\} - \{y, p_y - x\} \{p_x + x, p_x\} + \{y, p_x + x\} \{p_y - x, p_x\} = -1
 \end{aligned}$$

$\{y, p_y\}_D = \{y, p_y\} - \{y, p_y - x\} \{p_x + x, p_y\} + \{y, p_x + x\} \{p_y - x, p_y\} = 1$
 $\{p_x, p_y\}_D = \{p_x, p_y\} - \{p_x, p_y - x\} \{p_x + x, p_y\} + \{p_x, p_x + x\} \{p_y - x, p_y\} = 0$
 Les autres crochets sont nuls par antisymétrie. On remarque que les coordonnées x et y ne commutent pas alors que x et p_x commutent ce qui constitue une grande différence si on compare avec les crochets de Poisson.

Sachant que le hamiltonien canonique $H_c = \frac{p_x^2}{2} + xy$, il est possible d'obtenir les équations du mouvement comme suit :

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &\approx \{x, H_c\}_D &\Rightarrow \dot{x} &\approx -x \\
 \dot{y} &\approx \{y, H_c\}_D &\Rightarrow \dot{y} &\approx -p_x + y \\
 \dot{p}_x &\approx \{p_x, H_c\}_D &\Rightarrow \dot{p}_x &\approx x \\
 \dot{p}_y &\approx \{p_y, H_c\}_D &\Rightarrow \dot{p}_y &\approx -x
 \end{aligned}$$

La solution générale de ces équations qui satisfait les contraintes ξ_1 , et ξ_2 est de la forme

$$x = ae^{-t} \ ; \ p_x = -ae^{-t} \ ; \ y = be^t - \frac{a}{2}e^{-t} \ ; \ p_y = ae^{-t}$$

où a et b sont des constantes réelles et arbitraires. Un calcul direct montre qu'il s'agit aussi de la solution des équations $\ddot{x} = \dot{y} - y$ et $\dot{x} = -x$ qui ne sont que les équations d'Euler-Lagrange qu'on peut obtenir à partir du lagrangien du départ.

3.5 Symétrie de jauge et crochet de Dirac

Après avoir défini le crochet de Dirac en cas de contraintes de deuxième classe, on va essayer d'étendre la même analyse pour des systèmes décrits par des lagrangiens singuliers présentant des contraintes de première classe susceptibles de générer des transformations de jauge qui laissent invariant l'état physique de ces derniers. Supposons que nous sommes en présence de S contraintes de première classe notées $\gamma_s, s = 1 \dots S$ et de R contraintes de deuxième classe notées $\xi_r, r = 1 \dots R$ (R est pair). Pour fixer la jauge introduisons des conditions supplémentaires $\zeta_s(q, p) \approx 0$ où $s = 1 \dots S$ dont le nombre est égal au nombre des contraintes de première classe. Ces conditions de fixation de jauge doivent être conservées au cours du temps, alors

$$\dot{\zeta}_s \approx \{\zeta_s, H_T\} \approx 0 \Rightarrow \{\zeta_s, H_c\} + \lambda_m \{\zeta_s, \phi_m\} \approx 0 \quad m = 1 \dots M \quad (3.35)$$

où les ϕ_m sont des contraintes primaires. Ces équations avec les autres conditions de consistance doivent fixer les multiplicateurs définitivement. En d'autres termes, ces équations ne doivent pas donner naissance à d'autres contraintes (secondaires) ou nous conduire à une contradiction. Donc, si on pose $(\psi_1, \dots, \psi_R; \psi_{R+1},$

$\dots, \psi_{R+S}; \psi_{R+S+1}, \dots, \psi_{R+2S}) = (\xi_1, \dots, \xi_R; \gamma_1, \dots, \gamma_S; \zeta_1, \dots, \zeta_S)$, alors les $\psi_h, h = 1 \dots R+2S$ sera le nouveau ensemble de contraintes de notre système et elles seront toutes de deuxième classe. Les conditions de consistance seront alors

$$\dot{\psi}_h \approx \{\psi_h, H_T\} \approx 0 \Rightarrow \{\psi_h, H_c\} + \lambda_m \{\psi_h, \phi_m\} \approx 0 \quad m = 1 \dots M \quad (3.36)$$

où les ϕ_m sont des contraintes primaires. On peut maintenant définir la matrice des contraintes

$$\Delta = \begin{bmatrix} \{\psi_1, \psi_1\} & \dots & \dots & \{\psi_1, \psi_{R+2S}\} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \{\psi_{R+2S}, \psi_1\} & \dots & \dots & \{\psi_{R+2S}, \psi_{R+2S}\} \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

Cette matrice est inversible car nos nouvelles contraintes sont de deuxième classe. Soit

$$\Delta^{-1} = \begin{bmatrix} \{\psi_1, \psi_1\}^{-1} & \dots & \dots & \{\psi_1, \psi_{R+2S}\}^{-1} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \{\psi_{R+2S}, \psi_1\}^{-1} & \dots & \dots & \{\psi_{R+2S}, \psi_{R+2S}\}^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

Un raisonnement analogue au raisonnement fait dans la section précédente nous permet de définir le crochet de Dirac dans ce cas comme étant

$$\{f, g\}_D = \{f, g\} - \{f, \psi_h\} \{\psi_h, \psi_{h'}\}^{-1} \{\psi_{h'}, g\} \quad h, h' = 1 \dots R+2S \quad (3.39)$$

On a converti de ce fait un système ayant des contraintes de première classe en un système avec seulement des contraintes de deuxième classe par fixation de jauge, ce qui nous a permis de définir les crochets de Dirac qui vont jouer un rôle essentiel dans la quantification de ce genre de systèmes singuliers.

Exemple

On a vu dans la première section de ce chapitre que le lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + x\dot{y} + z^2\dot{z} - xy$ a deux contraintes primaires ($\phi_1 = x - p_y, \phi_2 = z^2 - p_z$) et une contrainte secondaire $\chi_1 = \phi_3 = x + p_x$. Les contraintes $\xi_1 = \phi_1$ et $\xi_2 = \phi_3$ sont de deuxième classe alors que $\gamma_1 = \phi_2$ est de première classe et elle génère une transformation de jauge qui laisse L invariant. On va fixer la jauge avec la condition supplémentaire $\zeta_1 = z \approx 0$, afin d'avoir un ensemble de contraintes de deuxième classe $\{\psi_1 = \gamma_1, \psi_2 = \xi_1, \psi_3 = \xi_2, \psi_4 = \zeta_1\} = \{\psi_1 = z^2 - p_z, \psi_2 =$

$x - p_y, \psi_3 = x + p_x, \psi_4 = z$. La matrice des contraintes sera

$$\Delta = \left[\{\psi_i, \psi_j\}_{i,j=1\dots 4} \right] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Le déterminant de cette matrice n'est pas nul ($\det(\Delta) = 1$), ce qui veut dire qu'elle est inversible.

$$\Delta^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

On en déduit que le crochet de Dirac va avoir l'expression

$$\begin{aligned} \{f, g\}_D &= \{f, g\} - \{f, \psi_1\} \Delta_{14} \{\psi_4, g\} - \{f, \psi_2\} \Delta_{23} \{\psi_3, g\} \\ &\quad - \{f, \psi_3\} \Delta_{32} \{\psi_2, g\} - \{f, \psi_4\} \Delta_{41} \{\psi_1, g\} \\ \{f, g\}_D &= \{f, g\} + \{f, \psi_1\} \{\psi_4, g\} + \{f, \psi_2\} \{\psi_3, g\} - \{f, \psi_3\} \{\psi_2, g\} \\ &\quad - \{f, \psi_4\} \{\psi_1, g\} \\ \{f, g\}_D &= \{f, g\} + \{f, z^2 - p_z\} \{z, g\} + \{f, x - p_y\} \{x + p_x, g\} \\ &\quad - \{f, x + p_x\} \{x - p_y, g\} - \{f, z\} \{z^2 - p_z, g\} \end{aligned}$$

Si on considère le cas des variables canoniques (x, y, z, p_x, p_y, p_z) , on aura les 15 crochets de Dirac suivants :

$$\begin{aligned} \{x, y\}_D &= -1 & \{x, z\}_D &= 0 & \{y, z\}_D &= 0 \\ \{x, p_x\}_D &= 0 & \{x, p_y\}_D &= 0 & \{x, p_z\}_D &= 0 \\ \{y, p_x\}_D &= -1 & \{y, p_y\}_D &= 1 & \{y, p_z\}_D &= 0 \\ \{z, p_x\}_D &= 0 & \{z, p_y\}_D &= 0 & \{z, p_z\}_D &= 0 \\ \{p_x, p_y\}_D &= 0 & \{p_x, p_z\}_D &= 0 & \{p_y, p_z\}_D &= 0 \end{aligned}$$

3.6 Quantification canonique des systèmes avec contraintes

La quantification canonique d'un système physique sans contraintes est étudiée dans le premier chapitre. Maintenant, une fois que nous avons une image assez complète de la formulation hamiltonienne classique des systèmes avec contraintes, il faut trouver le moyen de les quantifier. Deux cas se distinguent : le premier c'est quand toutes les contraintes sont de première classe, et le deuxième c'est quand notre système a des contraintes de deuxième classe.

3.6.1 Quantification de Dirac

Dans le cas où toutes les contraintes d'un système sont de première classe, il est possible, selon Dirac, de le quantifier en utilisant les mêmes relations de commutation que nous avons l'habitude d'imposer pour les systèmes réguliers (sans contraintes) à condition que la fonction d'onde qui va décrire l'état de notre système vérifie certaines conditions supplémentaires dues à la présence de ces contraintes. Autrement dit, soit un système ayant seulement S contraintes $\gamma_s, s = 1 \dots S$ toutes de première classe. Cela veut dire que

$$\{\gamma_s, \gamma_{s'}\} \approx 0 \Leftrightarrow \{\gamma_s, \gamma_{s'}\} = c_{ss's''} \gamma_{s''} \quad s, s', s'' = 1 \dots S \quad (3.40)$$

où les $c_{ss's''}$ sont des fonctions des coordonnées et des moments conjugués. on a vu aussi dans la section (3.1) que le hamiltonien H' est de première classe, ce qui implique que

$$\{\gamma_s, H'\} \approx 0 \Leftrightarrow \{\gamma_s, H'\} = b_{ss'} \gamma_{s'} \quad s, s' = 1 \dots S \quad (3.41)$$

où les $b_{ss'}$ sont des fonctions des coordonnées et des moments conjugués. Pour faire la transition vers la mécanique quantique on va d'abord construire des opérateurs hermitiques \hat{q}_i et \hat{p}_i agissant dans un espace de Hilbert tels que leurs commutateurs seront

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_{i'}] = 0 \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_{i'}] = i\hbar \delta_{ii'} \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_{i'}] = 0 \quad i, i' = 1 \dots N \quad (3.42)$$

où N est le nombre de degré de liberté de notre système. Ensuite, à l'aide de ces derniers, il faut faire correspondre aux contraintes $\gamma_s, s = 1 \dots S$ et au hamiltonien H' des opérateurs hermitiques $\hat{\gamma}_s, s = 1 \dots S$ et \hat{H}' vérifiant ces relations de commutation :

$$[\hat{\gamma}_s, \hat{\gamma}_{s'}] = \hat{c}_{ss's''} \hat{\gamma}_{s''} \quad [\hat{\gamma}_s, \hat{H}'] = \hat{b}_{ss'} \hat{\gamma}_{s'} \quad (3.43)$$

où les $\hat{c}_{ss's''}$ et $\hat{b}_{ss'}$ sont les opérateurs associés aux coefficients $c_{ss's''}$ et $b_{ss'}$ respectivement. A ce stade, Il est très important de remarquer que ces opérateurs ($\hat{c}_{ss's''}$ et $\hat{b}_{ss'}$) sont à gauche des opérateurs $\hat{\gamma}_s, s = 1 \dots S$ dans les expressions des commutateurs ci-dessus. La raison viendra après. Maintenant, on peut écrire l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}' \Psi \quad (3.44)$$

Classiquement nous avons $\gamma_s = 0, s = 1 \dots S$, ce qui va se traduire dans le domaine quantique par ces équations supplémentaires sur la fonction d'onde Ψ :

$$\hat{\gamma}_s \Psi = 0 \quad s = 1 \dots S \quad (3.45)$$

Il est utile de remarquer que

$$[\hat{\gamma}_s, \hat{\gamma}_{s'}] \Psi = (\hat{\gamma}_s \hat{\gamma}_{s'} - \hat{\gamma}_{s'} \hat{\gamma}_s) \Psi = \hat{\gamma}_s (\hat{\gamma}_{s'} \Psi) - \hat{\gamma}_{s'} (\hat{\gamma}_s \Psi) = 0 \quad (3.46)$$

Alors que d'un autre côté, $[\hat{\gamma}_s, \hat{\gamma}_{s'}] = \hat{c}_{ss's''}\hat{\gamma}_{s''}$ ce qui implique

$$[\hat{\gamma}_s, \hat{\gamma}_{s'}]\Psi = \hat{c}_{ss's''}\hat{\gamma}_{s''}\Psi = \hat{c}_{ss's''}(\hat{\gamma}_{s''}\Psi) = 0 \quad (3.47)$$

Les deux équations conduisent au même résultat et il n'y a pas d'anomalie. On peut faire le même raisonnement avec les commutateurs $[\hat{\gamma}_s, \hat{H}']$. C'est pour cette raison qu'il faut que les opérateurs $\hat{c}_{ss's''}$ et $\hat{b}_{ss'}$ soient à gauche des opérateurs $\hat{\gamma}_s, s = 1 \dots S$ dans les expressions des commutateurs ci-dessus. Le problème majeur c'est qu'on ne peut pas toujours être dans cette situation car contrairement aux variables classiques, les opérateurs ne commutent pas et leur ordre est très important.

Exemple Soit le lagrangien $L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + z\dot{y} + y\dot{z} - \frac{x^2}{2}$ ayant les deux contraintes primaires $\gamma_1 = p_y - z \approx 0$ et $\gamma_2 = p_z - y \approx 0$. L'algorithme de consistance montre qu'il n'y a pas de contraintes secondaires et que $H' = H_c = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{x^2}{2}$. Puisque $\{p_y - z, p_z - y\} = 0$, nos contraintes sont de première classe. Pour quantifier le système décrit par ce lagrangien, définissons d'abord les opérateurs associés aux variables fondamentales comme suit :

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x & \hat{y} &= y & \hat{z} &= z \\ \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} & \hat{p}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} & \hat{p}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

Maintenant soient

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{1}{2}\hat{p}_x^2 + \frac{\hat{x}^2}{2} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{2} \\ \hat{\gamma}_1 &= \hat{p}_y - \hat{z} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - z & \hat{\gamma}_2 &= \hat{p}_z - \hat{y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - y \end{aligned}$$

Classiquement nous avons $\{\gamma_1, \gamma_2\} = \{\gamma_1, H'\} = \{\gamma_2, H'\} = 0$. Un calcul simple d'opérateurs montre que

$$[\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_2] = [\hat{\gamma}_1, \hat{H}'] = [\hat{\gamma}_2, \hat{H}'] = 0$$

La fonction d'onde de notre système $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ doit vérifier les équations $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}'\Psi$, $\hat{\gamma}_1\Psi = 0$ et $\hat{\gamma}_2\Psi = 0$. Autrement dit,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{x^2}{2} \Psi \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial y} - z\Psi &= 0 & -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial z} - y\Psi &= 0 \end{aligned}$$

3.6.2 Quantification des systèmes avec contraintes de deuxième classe

Maintenant, supposons que notre système ne possède classiquement que des contraintes de deuxième classe $\xi_r, r = 1 \dots R$, ce qui veut dire que $\{\xi_r, \xi_{r'}\} \neq 0$.

Ici, on peut quantifier en imposant des conditions de type $\hat{\xi}_r \Psi = 0$ comme on l'a fait précédemment. En effet, ces conditions impliquent

$$[\hat{\xi}_r, \hat{\xi}_{r'}] \Psi = (\hat{\xi}_r \hat{\xi}_{r'} - \hat{\xi}_{r'} \hat{\xi}_r) \Psi = \hat{\xi}_r (\hat{\xi}_{r'} \Psi) - \hat{\xi}_{r'} (\hat{\xi}_r \Psi) = 0 \quad (3.48)$$

Mais classiquement $\{\xi_r, \xi_{r'}\} \approx 0$ ce qui se traduit sur le plan quantique par $[\hat{\xi}_r, \hat{\xi}_{r'}] = i\hbar \widehat{\{\xi_r, \xi_{r'}\}} \neq 0$, d'où

$$[\hat{\xi}_r, \hat{\xi}_{r'}] \Psi \neq 0 \quad (3.49)$$

ce qui constitue une contradiction avec l'équation précédente sauf si on pose $[\hat{\xi}_r, \hat{\xi}_{r'}] \Psi = 0$ comme des conditions supplémentaires sur la fonction d'onde Ψ . Il faut donc trouver un autre moyen pour arriver à notre objectif.

On a vu dans la section (3.3) qu'il est possible, dans cette situation, de définir directement des crochets de Dirac compatibles avec les contraintes qui vont remplacer les crochets de Poisson. Par analogie au cas régulier (sans contraintes), on va quantifier canoniquement notre système en imposant aux opérateurs de satisfaire les relations de commutation

$$[\hat{f}, \hat{g}] = [f(\hat{q}, \hat{p}), g(\hat{q}, \hat{p})] = i\hbar \{f(q, p), g(q, p)\}_D \quad (3.50)$$

où \hat{f} et \hat{g} sont les opérateurs hermitiques associés aux fonctions $f(q, p)$ et $g(q, p)$ définies dans l'espace des phases. En particulier

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_{i'}] = i\hbar \widehat{\{q_i, q_{i'}\}}_D \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_{i'}] = i\hbar \widehat{\{q_i, p_{i'}\}}_D \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_{i'}] = i\hbar \widehat{\{p_i, p_{i'}\}}_D \quad i, i' = 1 \dots N \quad (3.51)$$

Pour trouver de tels opérateurs on peut se servir de nos contraintes de deuxième classe en imposant que $\hat{\xi}_r = \xi_r(\hat{q}, \hat{p}) = 0, r = 1 \dots R$. Dans la représentation de Schrödinger, l'équation d'évolution de notre système sera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}_c(\hat{q}, \hat{p}) \Psi \quad (3.52)$$

Cette méthode se généralise facilement au cas où notre système possède des contraintes de première classe. Nous avons vu dans la section (3.5) qu'on peut transformer ce dernier en un système avec des contraintes de deuxième classe en ajoutant des conditions de jauge supplémentaires pour ensuite définir les crochets de Dirac. Une fois que nous avons obtenu ces crochets, nous avons qu'à utiliser la procédure présentée ci-dessus pour les systèmes avec seulement des contraintes de deuxième classe. Il est même possible de faire ça quand toutes les contraintes sont de première classe au lieu d'utiliser la quantification de Dirac discutée dans la sous-section précédente. Mais comme le cas de cette dernière, le problème de non commutativité des opérateurs, dans le domaine quantique, rend les choses très délicates car l'ordre est très important et a des conséquences physiques.

Exemple Nous avons vu dans l'exemple de la section (3.4) que le lagrangien $L = \frac{\dot{x}^2}{2} + x\dot{y} - xy$ donne naissance seulement à deux contraintes de deuxième classe $\xi_1 = p_y - x \approx 0$ et $\xi_2 = p_x + x \approx 0$ sachant que le hamiltonien canonique est $H_c = \frac{p_x^2}{2} + xy$. En plus, les crochets de Dirac des variables fondamentale sont

$$\begin{aligned} \{x, y\}_D &= -1 & \{x, p_x\}_D &= 0 & \{x, p_y\}_D &= 0 \\ \{y, p_x\}_D &= -1 & \{y, p_y\}_D &= 1 & \{p_x, p_y\}_D &= 0 \end{aligned}$$

Pour donner une version quantique du système décrit par ce lagrangien, on commence d'abord par poser

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{y}] &= -i\hbar & [\hat{x}, \hat{p}_x] &= 0 & [\hat{x}, \hat{p}_y] &= 0 \\ [\hat{y}, \hat{p}_x] &= -i\hbar & [\hat{y}, \hat{p}_y] &= i\hbar & [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= 0 \end{aligned}$$

Dans la représentation de Schrödinger, pour avoir le premier commutateur, il suffit de poser

$$\hat{x} = x \quad \hat{y} = y + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Classiquement, on a les deux contraintes de deuxième classe $p_y - x = 0$ et $p_x + x = 0$, ce qui nous suggère de poser dans le domaine quantique

$$\begin{aligned} \hat{p}_x + \hat{x} = 0 &\Rightarrow \hat{p}_x = -\hat{x} \Rightarrow \hat{p}_x = -x \\ \hat{p}_y - \hat{x} = 0 &\Rightarrow \hat{p}_y = \hat{x} \Rightarrow \hat{p}_y = x \end{aligned}$$

Comme $H_c = \frac{p_x^2}{2} + xy$, on peut construire l'opérateur hamiltonien comme suit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{y} + \hat{y}\hat{x})$$

Mais $[\hat{x}, \hat{y}] = -i\hbar \Rightarrow \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = -i\hbar \Rightarrow \hat{y}\hat{x} = \hat{x}\hat{y} + i\hbar$, d'où

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \hat{x}\hat{y} + \frac{i\hbar}{2} = \frac{x^2}{2} + xy + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{i\hbar}{2}$$

Pour terminer, la fonction d'onde $\Psi = \Psi(x, y, t)$ va obéir à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \left(\frac{x^2}{2} + xy + \frac{i\hbar}{2} \right) \Psi$$

3.7 Application à une particule dans un champ magnétique intense

En mécanique classique, une particule de charge q et de masse m se déplaçant dans le plan xy en présence d'un champ $\vec{B} = B_0 \vec{k}$ magnétique homogène orienté dans la direction z , peut être décrite par le lagrangien

$$L = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + q \vec{A} \cdot \vec{v} - qV$$

où $\vec{v} = (\dot{x}, \dot{y})$ est le vecteur vitesse, $\vec{A} = \vec{A}(x, y)$ est le potentiel vecteur du champ magnétique \vec{B} et $V = V(x, y)$ est le potentiel scalaire. Travaillons dans la jauge

$$\vec{A} = \frac{B_0}{2} (-y\vec{i} + x\vec{j})$$

Le lagrangien devient alors après simplification

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{qB_0}{2} (xy - yx) - qV(x, y)$$

On va considérer la limite où $\frac{qB_0}{m} \gg 1 \Rightarrow \frac{m}{qB_0} \ll 1 \Rightarrow \frac{m}{qB_0} \simeq 0$ qui correspond à un champ magnétique très intense. Dans ce cas, on peut négliger le terme de la masse. En effet, $L = \frac{qB_0}{2} [(\frac{m}{qB_0}) \simeq 0 (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + (xy - yx)] - qV(x, y) \simeq \frac{qB_0}{2} (xy - yx) - qV(x, y)$. Dans ce cas, le lagrangien va avoir la forme réduite

$$L = \frac{qB_0}{2} (xy - yx) - qV(x, y)$$

On remarque que la dernière forme du lagrangien L est linéaire par rapport aux vitesses. Essayons maintenant de quantifier notre système dans cette limite.

Par définition les moments conjugués sont

$$p_x = -\frac{qB_0}{2}y \quad p_y = \frac{qB_0}{2}x$$

On voit directement apparaître deux contraintes primaires

$$\phi_1 = p_x + \frac{qB_0}{2}y \approx 0 \quad \phi_2 = p_y - \frac{qB_0}{2}x \approx 0$$

Le hamiltonien canonique

$$\begin{aligned} H_c &= \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - \frac{qB_0}{2}(xy - yx) + qV(x, y) \\ H_c &= \dot{x} \underbrace{\left(p_x + \frac{qB_0}{2}y\right)}_{=\phi_1} + \dot{y} \underbrace{\left(p_y - \frac{qB_0}{2}x\right)}_{=\phi_2} + qV(x, y) = qV(x, y) \end{aligned}$$

Sachant que le hamiltonien total $H_T = H_c + \lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2$, on obtient

$$H_T = qV(x, y) + \lambda_1 \left(p_x + \frac{qB_0}{2}y\right) + \lambda_2 \left(p_y - \frac{qB_0}{2}x\right)$$

où λ_1 et λ_2 sont les multiplicateurs de Dirac.

L'étape suivante consiste à d'imposer les conditions de consistence $\{\phi_j, H_T\} \approx 0$ avec $j = 1, 2$.

$$\begin{aligned} \{\phi_1, H_c\} + \lambda_2 \{\phi_1, \phi_2\} &\approx 0 \Rightarrow -q \frac{\partial V}{\partial x} + \lambda_2 q B_0 \approx 0 \\ \{\phi_2, H_c\} + \lambda_1 \{\phi_2, \phi_1\} &\approx 0 \Rightarrow -q \frac{\partial V}{\partial y} - \lambda_1 q B_0 \approx 0 \end{aligned}$$

Ces conditions fixent définitivement les valeurs de λ_1 et λ_2 . Autrement dit, $\lambda_1 \approx -B_0^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)$ et $\lambda_2 \approx B_0^{-1} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)$. Par conséquent, il n'y a pas de contraintes secondaires. Les deux contraintes ϕ_1 et ϕ_2 sont de deuxième classe car

$$\{\phi_1, \phi_2\} = -\{\phi_2, \phi_1\} = qB_0 \neq 0$$

Il sera commode de les noter ξ_1 et ξ_2 dans cet ordre. Calculons maintenant la matrice des contraintes Δ .

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & \{\xi_1, \xi_2\} \\ \{\xi_2, \xi_1\} & 0 \end{bmatrix} = qB_0 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

D'où

$$\Delta^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & \{\xi_1, \xi_2\}^{-1} \\ \{\xi_2, \xi_1\}^{-1} & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{qB_0} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

A ce stade, il est possible de définir le crochet de Dirac de deux fonctions $f = f(x, y, p_x, p_y)$ et $g = g(x, y, p_x, p_y)$ par l'expression suivante :

$$\{f, g\}_D = \{f, g\} - \{f, \xi_1\} \{\xi_1, \xi_2\}^{-1} \{\xi_2, g\} - \{f, \xi_2\} \{\xi_2, \xi_1\}^{-1} \{\xi_1, g\}$$

$$\begin{aligned} \{f, g\}_D &= \{f, g\} \\ &+ \frac{1}{qB_0} (\{f, p_x + \frac{qB_0}{2}y\} \{p_y - \frac{qB_0}{2}x, g\} - \{f, p_y - \frac{qB_0}{2}x\} \{p_x + \frac{qB_0}{2}y, g\}) \end{aligned}$$

En cas particulier, les crochets non nuls des variables fondamentales sont

$$\{x, y\}_D = -\frac{1}{qB_0} \quad \{x, p_x\}_D = \frac{1}{2} \quad \{y, p_y\}_D = \frac{1}{2} \quad \{p_x, p_y\}_D = 1$$

Afin de donner une description quantique de notre particule, on doit construire des opérateurs \hat{x} , \hat{y} , \hat{p}_x et \hat{p}_y hermitiques agissant dans un espace de Hilbert qui vérifient les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{y}] &= -\frac{i\hbar}{qB_0} & [\hat{x}, \hat{p}_x] &= \frac{i\hbar}{2} \\ [\hat{y}, \hat{p}_y] &= \frac{i\hbar}{2} & [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= i\hbar \end{aligned}$$

Les autres commutateurs doivent être nuls. On remarque déjà que le commutateur $[\hat{x}, \hat{y}] \neq 0$ ce qui veut dire que les opérateurs des coordonnées ne commutent pas. Cela peut être vu comme une sorte de géométrie non commutative. Dans la représentation de Schrödinger, il est possible de réaliser la première relation en choisissant

$$\hat{x} = x - \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{y} = y + \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial x} \quad (I)$$

Classiquement, on a vu ci-dessus que notre système possède les contraintes $p_x + \frac{qB_0}{2}y = 0$ et $p_y - \frac{qB_0}{2}x = 0$. Si on veut étendre ces relations au domaine quantique, il faut que

$$\hat{p}_x + \frac{qB_0}{2}\hat{y} = 0 \quad \hat{p}_y - \frac{qB_0}{2}\hat{x} = 0$$

ce qui nous suggère de poser

$$\hat{p}_x = -\frac{qB_0}{2}\hat{y} \quad \hat{p}_y = \frac{qB_0}{2}\hat{x}$$

En utilisant les relations (I), on obtient

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -\frac{qB_0}{2} \left(y + \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial x} \right) & \hat{p}_y &= \frac{qB_0}{2} \left(x - \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{p}_x &= -\frac{qB_0}{2}y - \frac{i\hbar}{4} \frac{\partial}{\partial x} & \hat{p}_y &= \frac{qB_0}{2}x - \frac{i\hbar}{4} \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned}$$

Maintenant, pour simplifier les choses et pour éviter le problème de l'ordre des opérateurs, supposons que $H_c = qV(x, y) = q(\alpha x + \beta xy)$. L'opérateur hamiltonien \hat{H} peut alors prendre la forme

$$\hat{H} = q \left(\alpha \hat{x} + \beta \frac{\hat{x}\hat{y} + \hat{y}\hat{x}}{2} \right) = q \left(\alpha \hat{x} + \beta \frac{\hat{x}\hat{y} + \hat{y}\hat{x}}{2} \right)$$

Mais $[\hat{x}, \hat{y}] = \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = -\frac{i\hbar}{qB_0} \Rightarrow \hat{y}\hat{x} = \hat{x}\hat{y} + \frac{i\hbar}{qB_0}$. Donc

$$\hat{H} = q \left(\alpha \hat{x} + \beta \left(\hat{x}\hat{y} + \frac{i\hbar}{2qB_0} \right) \right)$$

Finalement, l'équation de Schrödinger va s'écrire

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = q \left(\alpha \hat{x} + \beta \hat{x}\hat{y} + \frac{i\hbar\beta}{2qB_0} \right) \Psi$$

où $\Psi = \Psi(x, y, t)$ est la fonction d'onde qui détermine l'état de notre système. En utilisant les opérateurs (I), l'équation précédente aura la forme

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = q \left(\alpha \left(x - \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \beta \underbrace{\left(x - \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y + \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial x} \right)}_{=\hat{O}_p} + \frac{i\hbar\beta}{2qB_0} \right) \Psi$$

Sachant que $\frac{\partial}{\partial y}y = y\frac{\partial}{\partial y} + 1$, Calculons d'abord \hat{O}_p .

$$\begin{aligned} \hat{O}_p &= xy + \frac{i\hbar}{2qB_0}x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\hbar}{2qB_0} \frac{\partial}{\partial y}y + \frac{\hbar^2}{4q^2B_0^2} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \\ &= xy + \frac{i\hbar}{2qB_0}x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\hbar}{2qB_0} \left(y \frac{\partial}{\partial y} + 1 \right) + \frac{\hbar^2}{4q^2B_0^2} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \\ &= -\frac{i\hbar}{2qB_0} + xy + \frac{i\hbar}{2qB_0}x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\hbar}{2qB_0}y \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\hbar^2}{4q^2B_0^2} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \end{aligned}$$

Finalement, l'équation de Schrödinger va se réduire à la forme

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = q(\alpha x + \beta xy)\Psi - \frac{i\hbar\alpha}{2B_0} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{i\hbar\beta}{2B_0} x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{i\hbar\beta}{2B_0} y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{\hbar^2\beta}{4qB_0^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x}$$

Pour récapituler, nous avons commencé par un lagrangien linéaire par rapport aux vitesses ce qui a donné naissance à deux contraintes primaires de deuxième classe. A l'aide de ces contraintes, nous avons construit les crochets de Dirac ce qui a rendu possible la quantification canonique. Finalement nous avons écrit l'équation de Schrödinger après avoir choisi les bons opérateurs différentiels vérifiant l'algèbre des commutateurs.

Conclusion Générale

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés des systèmes physiques décrits par des lagrangiens singuliers. Nous avons à cette occasion développé une théorie consistante permettant de déterminer l'évolution dynamique de tels systèmes dans le cadre de la formulation hamiltonienne. La transition au traitement hamiltonien a exigé une transformation de Legendre, mais en raison de la nature singulière du lagrangien, celle-ci a donné naissance à certaines relations entre les variables de l'espace des phases qui ne sont que les contraintes primaires.

Pour continuer, ces contraintes primaires sont ajoutées au hamiltonien canonique avec des coefficients appelés les multiplicateurs de Dirac, ce qui nous a permis de généraliser les notions de la mécanique analytique pour les systèmes avec contraintes. Une conséquence directe de cette procédure est l'apparition de nouvelles contraintes secondaires que l'évolution de notre système doit préserver dans le temps d'où l'algorithme de Dirac -Bergmann.

Le formalisme construit nous a conduit à une distinction naturelle entre des contraintes de première classe et des contraintes de deuxième classe. Nous avons, par la suite, prouvé que les contraintes primaires de la première classe génèrent des transformations de jauge car les multiplicateurs de Dirac couplant ces contraintes avec le hamiltonien canonique ne peuvent pas être fixés avec les conditions de consistance. Par conséquent, on a conclu que tout système physique ayant des contraintes de première classe possède des symétries de jauge.

Contrairement aux contraintes de la première classe, il est possible de fixer les multiplicateurs couplant les contraintes de deuxième classe. Ceci nous a amenés à définir le crochet de Dirac, qui est une généralisation du crochet de Poisson, pour des systèmes avec des contraintes de deuxième classe. Nous avons même démontré comment éliminer les contraintes de première classe de la théorie en imposant des conditions de fixation de la jauge afin de définir encore le crochet de Dirac.

Après examen des deux classes de contraintes, nous nous sommes occupés de la quantification de la théorie développée. En effet, nous avons remplacé les crochets de Poisson par les crochets de Dirac dans la formule de la quantifi-

cation canonique pour déterminer les relations de commutation des opérateurs quantiques.

Ce travail reste une introduction à l'étude des systèmes singuliers, et il sera très utile d'essayer d'appliquer ce formalisme en théorie quantique des champs afin de voir son vrai intérêt car à part le lagrangien de Klein-Gordon, tous les autres champs, le champs gravitationnel y compris, sont décrits par des lagrangiens singuliers.

Bibliographie

- [1] Paul.A.M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*, Belfer Graduate School of Science (1964).
- [2] Marc Henneaux And Claudio Teitelboim, *Quantization Of Gauge Systems*, Princeton University Press (1991).
- [3] Christian Fräbendorf, *Quantization of Singular Systems in Canonical Formalism*, Freie Universität Berlin (2011).
- [4] Christiane Schomblond, *Theorie Hamiltonienne A Contraintes*, universite libre de Bruxelles
- [5] Sanjeev S. Seahra, *The Classical and Quantum Mechanics of Systems with Constraints*, University of Waterloo (2002).
- [6] Halard I W Müller-Kirsten, *Introduction To Quantum Mechanics*, World Scientific Publishing Co.Pte.Ltd(2006).
- [7] A. Wipt, *Hamilton's Formalism For Systems With Constraints*, Institute For Theoretical Physics, Eidgenössische Technische Hochschule, Hönggerberg, CH-8093 Zürich, Switzerland.
- [8] P.Amiot et L.Marleau, *Mécanique Classique II*, Université Laval, Québec, Canada, (1998).
- [9] Jonathan Ferreira, *Cours de Mécanique Analytique*, Université Joseph Fourier, (2003).
- [10] Olivier Richoux, *Mécanique Analytique*, Laboratoire d'Acoustique de l'Université du Maine UMR CNRS 6613
- [11] Frédéric Faure, *Cours de Mécanique Analytique, en Licence 3 de physique*, Université Joseph Fourier (2010).
- [12] Ruth Durrer, *Mecanique Analytique*, Université de Genève (2012).
- [13] Winston FAIRBAIRN et Catherine MEUSBURGER, *Crochets de Poisson, théories de jauge et quantification*,
- [14] Bertrand Berche, *Approche lagrangienne de la physique des milieux continus*, université Henri Poincaré, Nancy 1 (2007).
- [15] Nicolas Sator, *Rudiments de mécanique analytique*, Université Pierre et Marie Curie Paris 6 (2008).
- [16] A.Charlier, A.Bérard, M.F.Charlier, *mécanique analytique*, ellipses, (1989).
- [17] Wikipedia, the free encyclopedia, *Dirac bracket*, [http : //en.wikipedia.org/wiki/Dirac- bracket](http://en.wikipedia.org/wiki/Dirac-bracket).