

1. INTRODUCTION	3
2. CONVENTIONS PRELIMINAIRES.....	5
2.1 Notations	5
3. RAPPELS.....	6
3.1 Variété	6
3.1.1 Variétés différentiables.....	6
3.1.1.1 Définition d'une Carte	6
3.1.1.2 Définition Variété différentiable	6
3.2 Forme différentielle	7
3.2.1 Définition	7
3.2.2 Définition: 1-forme différentielle sur les Variétés	8
3.3 Principaux opérateurs différentiels linéaires.....	8
3.3.1 Opérateur formel nabla	8
3.3.2 Correspondance avec les notations	9
3.3.3 Lien avec les champs de vecteurs	9
4. COORDONNEES GENERALISEES.....	10
4.1 Mécanique newtonienne	10
4.2 Mécanique analytique	10
4.2.1 Fibré vectoriel	10
4.2.2 Section d'un Fibré	11
4.2.3 Espace des phases.....	12
5. MECANIQUE NEWTONIENNE.....	14
5.1 Lois de Newton	14
5.2 Energie	14
6. MECANIQUE LAGRANGIENNE & PRINCIPE DE MOINDRE ACTION (D'ACTION EXTREMALE)	16

6.1	Formules d'Euler Lagrange	16
6.2	Application à la mécanique classique	17
7.	MECANIQUE HAMILTONIENNE.....	18
7.1	Équations canoniques de Hamilton	18
7.1.1	Exemple (simple) d'application	20
7.2	Crochet de Poisson.....	20
7.3	Principe d'action extrémale	22
7.4	Structure symplectique et transformations canoniques.....	23
7.4.1	Définition	23
7.4.2	Flot	23
7.4.3	Structure symplectique de l'espace de phase.....	24
7.4.4	Transformations canoniques	25
7.4.5	Le théorème de Liouville.....	27
7.5	Etats et observables classiques	29
7.5.1	Changement de variable	29
7.5.2	Champ Hamiltonien	30
7.5.3	Mécanique statistique	31
7.6	Mécanique Quantique	31
7.6.1	Représentation.....	33

1. Introduction

Le but de ce document est de faire une introduction à la physique quantique. Comme les mathématiques nécessaires pour aborder ce domaine sont assez pointues, un des objectifs est de montrer quels sont les outils qui permettent une approche rigoureuse de cette physique, sans forcément écrire tous les développements nécessaires. On pourra donc admettre certains théorèmes lorsque la démonstration est fastidieuse mais que le résultat est bien connu et facilement accessible.

Dans ce document je n'ai rien produit d'original : le but est de me permettre de mieux comprendre la physique quantique, j'ai donc copié dans divers documents, que je liste, des passages entiers qui me semblaient éclairant, et puis il a fallu harmoniser les notations, des définitions plus générales m'ont semblées meilleures que celle d'abord copiées, un argument ou une explication trouvée ici ou là m'ont parus pouvoir s'insérer facilement sans dénaturer la progression du raisonnement. Si bien qu'à la fin il est difficile de voir quels sont les emprunts et ce qui revient à chacun.

Dans un premier temps j'introduis les mathématiques nécessaires pour aborder la physique quantique et la relativité générale afin de l'appliquer à la physique classique, à titre de familiarisation avec ces outils. Le but est d'ensuite les utiliser pour expliquer la physique moderne.

Dans cette introduction on donne un aperçu de la première partie, en utilisant des outils et des notations qui ne sont pas définis mais qui le seront au fur et à mesure des besoins après cet aperçu global.

Classiquement, la formulation lagrangienne de la mécanique est fondée sur l'observation de l'existence de principes variationnels derrière les lois fondamentales qui mettent en jeu un équilibre des forces. On peut ainsi appliquer ce formalisme à de nombreux domaines de la physique et voir que cela convient à la description de nombreux phénomènes autres que la mécanique.

La mécanique newtonienne permet de montrer que si on considère une particule ayant une position $q(t)$ dans l'espace à un temps t , se déplaçant avec une vitesse $v = \dot{q}(t)$ dans un référentiel inertiel, alors:

- Les équations du mouvement sont données par un lagrangien : il faut, pour avoir la dynamique d'une particule, lui fournir une fonction sur le fibré tangent TM correspondant à l'espace des phases.
- Si de plus le système présente des symétries, il existe des quantités conservées comme par exemple l'énergie, le moment cinétique, et bien d'autres possibilités.
- Il existe un espace dual, défini par le fibré cotangent T^*M sur lequel le lagrangien est remplacé par un hamiltonien. Les équations du mouvement y sont équivalentes, mais la structure mathématique du formalisme hamiltonien est plus riche.
- Il existe naturellement sur T^*M une structure symplectique correspondant à des formes différentielles, indépendant du système de coordonnées, tenseurs d'ordre $(r,0)$, et donc répondant parfaitement au principe de relativité.
- Cette structure avec la dynamique donnée par l'hamiltonien, ou plus particulièrement le moment conjugué, permet de définir un principe variationnel donnant une action, qui est bien dépendante du lagrangien comme suggérées par les équations d'Euler-Lagrange.
- Pour que la particule (autre que le photon) se mette en mouvement, il faut la doter d'une quantité intrinsèque à la particule : sa masse inertielle. Son mouvement devra aussi tenir compte de forces induites par des potentiels, notamment attractif comme la gravitation. On a ainsi une définition physique de la notion de masse répondant au principe d'équivalence newtonien.

Pour cela, il suffit de doter l'espace tangent $TM = \mathcal{R}^{2n}$ de coordonnées (q, \dot{q}) , d'une simple fonction donnant la dynamique, le lagrangien. Ce lagrangien rend de plus compte des couplages entre différents phénomènes et permet de définir toute une structure mathématique riche, très utile pour comprendre la dynamique du système.

Par la suite, c'est en se basant sur cette structure mathématique (qui n'est bien sûr pas apparue directement mais après beaucoup d'étapes de compréhension) que se sont formées les autres théories, plus complètes et donnant une meilleure description des phénomènes physiques, la mécanique classique n'en étant qu'un cas limite.

2. Conventions préliminaires

2.1 Notations

- On utilise des lettres latines i, j, k, \dots pour désigner des indices variant de 1 à 4.
- On utilise des lettres grecques α, β, \dots pour désigner des indices variant de 1 à 3 et la lettre t comme indice désignant le temps.
- On utilise λ, ν, \dots pour désigner des indices variant de 1 à n .
- Un indice répété en haut et en bas indique une sommation.
- La métrique de l'univers de Minkowski est :

$$ds^2 = dx^i dx_i = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 - c^2 dt^2.$$

- On note:

- $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ et $\partial^i = \frac{\partial}{\partial x^i}$

- $\partial^i \partial_i = \partial_i^i,$

- $\partial_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}.$

Où les indices peuvent être des lettres latines ou grecques.

- $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ où t désigne le temps

- $\dot{q} = \partial_t q$ et $\ddot{q} = \partial_t^2 q$

3. Rappels

<http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/publi/eem/node1.html>

3.1 Variété

Les modèles locaux en géométrie différentielle sont les ouverts d'espaces vectoriels de dimension finie. Les objets et leurs propriétés peuvent se définir sur de tels espaces ; leurs invariances par difféomorphismes autorisent ensuite le passage aux variétés.

Une variété M de classe C^{k+1} peut être décrite comme un ensemble d'ouverts de l'espace $E = \mathcal{R}^n$, recollés par des difféomorphismes de classe C^{k+1} , les changements de cartes.

3.1.1 Variétés différentiables

Soit M un espace topologique.

3.1.1.1 Définition d'une Carte

Une carte ou carte locale sur M est un homéomorphisme d'un ouvert de M vers un ouvert de \mathcal{R}^n , c'est-à-dire un couple (U, φ) où U est un ouvert de M , $\varphi : U \rightarrow \mathcal{R}^n$ est un homéomorphisme, et l'image $V = \varphi(U)$ est un ouvert de \mathcal{R}^n . Si $\varphi : U \rightarrow \mathcal{R}^n$ et $\varphi' : U' \rightarrow \mathcal{R}^n$ sont deux cartes et $U \cap U' \neq \emptyset$ l'application $\psi = \varphi' \circ \varphi^{-1} : \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^n$ s'appelle changement de carte. C'est évidemment un homéomorphisme de $\varphi(U \cap U')$ vers $\varphi'(U \cap U')$.

3.1.1.2 Définition Variété différentiable

On appelle variété différentiable de dimension n un espace topologique M muni d'une famille de cartes $\mathcal{A} = \{\varphi_r : U_r \rightarrow \mathcal{R}^n\}$ telle que

1. L'ensemble $\mathcal{A} = \{U_r\}$ est un recouvrement de M ;
2. Les changements de cartes $\psi_{rs} = \varphi_r \circ \varphi_s^{-1}$ sont des difféomorphismes (i.e. des applications réelles inversibles, différentiables et avec réciproque différentiable) ;
3. La famille est maximale, c'est-à-dire qu'elle contient toutes les cartes compatibles entre elles (dans le sens que les changements de cartes sont des difféomorphismes).

Une telle famille s'appelle atlas (maximal) sur M .

Une variété M s'appelle différentiable de classe C^{k+1} , ou de classe C^∞ (lisse), si les changements de cartes ψ_{rs} sont des difféomorphismes de classe C^{k+1} (i.e. différentiables $k+1$ fois avec dernière dérivée continue et leurs réciproques aussi), ou bien de classe C^∞ (i.e. différentiables autant de fois qu'on veut ainsi que leurs réciproques).

Normalement on suppose qu'une variété différentiable soit:

- un espace de Hausdorff, ce qui garantit que la limite d'une suite convergente soit unique,
- et à base dénombrable d'ouverts (et donc para-compact), ce qui garantit l'existence d'une partition de l'unité.

Un espace topologique M doté d'un atlas de cartes dont les changements de cartes sont des simples homéomorphismes est une variété topologique.

3.2 Forme différentielle

Une 1-forme différentielle sur un ouvert d'un espace vectoriel normé est un champ de formes linéaires c'est-à-dire une application, qui, à chaque point de l'espace, fait correspondre une forme linéaire. Plus généralement, on peut définir de telles formes linéaires sur une variété différentielle. La définition d'une 1-forme est analogue à celle d'un champ de vecteurs ; ces deux notions sont d'ailleurs en dualité. Pour cette raison, les 1-formes différentielles sont parfois appelées des covecteurs ou champs de covecteurs, en particulier en physique.

L'exemple le plus simple de 1-forme différentielle est la différentielle d'une fonction numérique f , qui se note df . Par extension, il est possible de définir des 1-formes différentielles à valeurs dans des espaces vectoriels.

3.2.1 Définition

Étant donné un espace vectoriel normé réel ou complexe E et U un ouvert de E , une forme différentielle ω (de degré 1) de classe C^k sur U est une application de classe C^k de U dans l'espace dual E^* de E . En chaque point u de U , $\omega(u)$ est donc une forme linéaire, qui peut être appliquée à un vecteur h de E : $\omega(u)(h)$ est donc un scalaire (un réel ou un complexe).

En dimension finie, le choix d'une base de E permet d'exprimer les 1-formes différentielles. Plus exactement, si une base $e = (e_1, \dots, e_n)$ de E est donnée, il lui est associée la base duale de E^* : les éléments de celle-ci sont notés e_i^* ou dx_i . Par

définition, dx_i appliqué sur un vecteur donne sa i -ème coordonnée dans la base e . Toute forme linéaire sur E s'exprime de manière unique comme combinaison linéaire des dx_i ; de même, la forme différentielle ω dans la base e s'exprime de manière unique sous la forme: $\omega(u) = a_1(u)dx_1 + \dots + a_n(u)dx_n$

Où a_1, \dots, a_n sont des fonctions de classe C^k sur U .

Exemple :

Pour une fonction f de classe C^{k+1} sur l'ouvert U , sa différentielle df est une forme

différentielle de classe C^k . Elle s'écrit explicitement : $df(u) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(u)dx_i$

3.2.2 Définition: 1-forme différentielle sur les Variétés

Une 1-forme différentielle de classe C^k sur M est la donnée d'une 1-forme différentielle sur chacun de ses ouverts telle que ces formes se correspondent par l'action des changements de carte. Plus exactement, c'est un champ de formes linéaires sur les espaces tangents $T_x M$.

3.3 Principaux opérateurs différentiels linéaires

Le gradient, la divergence et le rotationnel sont les trois principaux opérateurs différentiels linéaires du premier ordre.

3.3.1 Opérateur formel nabla

L'opérateur nabla ∇ est un opérateur formel de \mathcal{R}^3 défini en coordonnées cartésiennes par $\nabla = \partial_\alpha$

On écrit aussi $\vec{\nabla}$ pour rappeler que l'opérateur nabla a trois composantes comme un vecteur. La notation nabla permet d'exprimer les opérateurs vectoriels en coordonnées cartésiennes, elle est utilisée en dimension 3 pour représenter aisément la divergence $\nabla \cdot X$, le rotationnel $\nabla \wedge X$ et le laplacien vectoriel $\Delta X = \nabla^2 X$ d'un champ vectoriel X , ainsi que le gradient ∇f et le laplacien $\Delta f = \nabla^2 f$ d'un champ scalaire f .

3.3.2 Correspondance avec les notations

Opération	Coordonnées Cartésiennes u^α
X	$x_\alpha u^\alpha$
∇	$u_\alpha \partial^\alpha$
∇f	$u_\alpha \partial^\alpha f$
$\Delta f = \nabla^2 f$	$\partial_\alpha^\alpha f$
$\nabla \cdot X$	$\partial^\alpha X_\alpha$
$\nabla \wedge X$	$(\partial^\beta X_\gamma - \partial^\gamma X_\beta)u_\alpha$ $+(\partial^\alpha X_\gamma - \partial^\gamma X_\alpha)u_\beta$ $+(\partial^\beta X_\alpha - \partial^\alpha X_\beta)u_\gamma$
$\Delta X = \nabla^2 X$	$\partial_\alpha^\alpha x_\beta u^\beta$

3.3.3 Lien avec les champs de vecteurs

Si E , de dimension finie, est muni d'un produit scalaire, il existe un isomorphisme entre E et son dual. On peut donc établir une correspondance entre formes différentielles et champs de vecteurs : si ω est une forme différentielle sur U , il existe un unique champ de vecteurs X sur U tel que

$$\forall u \in U, \forall h \in E, \quad \omega(u)(h) = \langle X(u) | h \rangle.$$

A la notion de forme différentielle exacte ayant f pour primitive correspond alors celle de champ de gradient, dérivant du potentiel $f : \langle \nabla f(u) | h \rangle = d_u f(h)$

4. Coordonnées généralisées

Nous considérerons un système composé de n particules matérielles repérées par un indice grec λ , variant de 1 à n . Une telle description peut convenir à tout système discret de particules ponctuelles mais aussi à la description du mouvement d'un solide, après une discrétisation convenable en éléments infinitésimaux.

4.1 Mécanique newtonienne

L'approche de la mécanique newtonienne consiste à écrire le principe fondamental de la dynamique, reliant les accélérations des diverses particules constituant le système aux forces s'exerçant sur elles. L'expression de ces forces est donnée, en fonction de la configuration du système, par des lois fondamentales et par les contraintes.

L'écriture des équations dynamiques du système et des conditions initiales permet de déterminer complètement le mouvement.

4.2 Mécanique analytique

Au contraire l'approche de la mécanique analytique est de n'employer que des coordonnées indépendantes qui ne seront soumises à aucune contrainte qu'on appelle "coordonnées généralisées". Ces coordonnées sont de nature arbitraire (des positions, des angles...) mais doivent déterminer de façon unique l'état mécanique du système si on prend en compte les contraintes. L'ensemble des coordonnées généralisées que le système peut atteindre s'appelle l'espace de configuration. Il a une structure naturelle de variété et peut être étudié d'un point de vue géométrique ou topologique. On définira l'espace des phases comme étant le fibré cotangent associé:

4.2.1 Fibré vectoriel

Les fibrés vectoriels sont un cas particulier de fibré, ayant pour fibres des espaces vectoriels. Pour construire un fibré vectoriel on considère un espace topologique X appelé base et un espace vectoriel modèle F appelé fibre modèle. A chaque point de la base est associée une fibre copie de la fibre modèle, l'ensemble formant un nouvel espace topologique : l'espace total du fibré E . Celui-ci admet localement la structure d'un produit cartésien de la base par la fibre modèle, mais peut avoir une topologie globale plus compliquée. Pour formaliser cette définition il nous faut une projection

$$\pi : E \rightarrow X \text{ Qui est continue}$$

On dira que le fibré vectoriel est de rang n si on peut définir une trivialisatation φ locale sur \mathcal{R}^n de la manière suivante

$\varphi: U \times \mathcal{R}^n \rightarrow \pi^{-1}(U)$ Où $U \subset X$ est un ouvert et φ est telle que

- $\forall x \in U, \pi\varphi(x, v) = x$ Pour tout vecteur $v \in \mathcal{R}^n$
- L'application $v \rightarrow \varphi(x, v)$ induit un isomorphisme de \mathcal{R}^n sur $\pi^{-1}(\{x\})$.

De plus chaque élément de la base X doit être contenu dans un voisinage ouvert U de trivialisatation.

Le fibré vectoriel E est dit différentiable de classe C^k lorsque :

- X et F sont des variétés différentielles de classe C^k .
- La projection π est de classe C^k .
- Il existe des trivialisatations locales de classe C^k .

4.2.2 Section d'un Fibré

En topologie, une section d'un fibré, $\pi: E \rightarrow X$, sur un espace topologique, X , est une fonction continue, $f: X \rightarrow E$, telle que $\pi(f(x)) = x$ pour tout x de X .

Une section est une généralisation de notion de graphe d'une fonction. Le graphe d'une fonction $g: X \rightarrow Y$ peut être identifié à une fonction prenant ses valeurs dans le produit cartésien $E = X \times Y$ de X et Y :

$$f(x) = (x, g(x)) \in E, f: X \rightarrow E.$$

Une section est une caractérisation abstraite de ce qu'est un graphe. Soit $\pi: E \rightarrow X$ la projection sur le premier facteur du produit cartésien $\pi(x, y) = x$. Alors on appelle graphe toute fonction f pour laquelle $\pi(f(x)) = x$.

La notion d'espace fibré permet d'élargir cette notion de graphe au-delà du cas où E est un produit cartésien. Si $\pi: E \rightarrow X$ est un espace fibré, alors une section est le choix d'un point $f(x)$ dans chacune des fibres. La condition $\pi(f(x)) = x$ signifie simplement que la section au point x doit être située dans la fibre liée à x .

Le fibré cotangent associé à une variété différentielle C est le fibré vectoriel T^*M constitué des espaces cotangents (espace dual de l'espace tangent) en chaque point de la

variété. Si M est une variété différentielle et x un point de la variété, l'espace cotangent en x est défini comme l'espace dual de l'espace tangent en x : $T_x^*(M) = (T_x M)^*$.

4.2.3 Espace des phases

Les formes différentielles de degré 1 (ou 1-formes) sont des champs de formes linéaires sur une variété différentielle. Dit autrement, on se donne une forme linéaire en chaque espace tangent $T_x M$ avec une dépendance régulière en x . La dépendance en x peut facilement être précisée par l'expression dans des cartes locales.

Les formes différentielles se définissent comme une extension en géométrie différentielle des formes multilinéaires alternées.

Pour une variété différentielle M , une forme différentielle ω de degré k sur M est un champ d'applications k -linéaires alternées sur les espaces tangents $T_x M$ tel que pour tous champs de vecteurs X_1, \dots, X_k , la fonction $x \rightarrow \omega_x(X_1(x), \dots, X_k(x))$ soit de classe C^∞ .

De même que pour les 1-formes différentielles, il est possible de donner l'expression locale des formes différentielles de degré k grâce au produit extérieur.

Parmi les 1-formes différentielles du fibré, il existe la 1-forme tautologique (ou de Poincaré, ou de Liouville, ou canonique, ou potentiel symplectique). Sa dérivée extérieure donne une 2-forme symplectique canonique : à ce titre les fibrés cotangents peuvent être considérés comme des variétés symplectiques.

On verra que le crochet de poisson donne à l'espace des phases une structure symplectique et c'est pourquoi le fibré cotangent d'une variété différentielle peut être considéré comme l'espace des phases d'un système dynamique (dont la variété paramètre les variables de position), et qu'on peut y écrire des équations d'évolution.

En mécanique classique, on utilise, pour représenter un système, un espace des phases qui est une variété symplectique (M, ω) . Un état du système est représenté par un point z de l'espace des phases. Une observable est une fonction f , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable f lorsque l'état du système est le point z est tout simplement $f(z)$. L'évolution de l'état du système au cours du temps obéit à une équation différentielle, l'équation de Hamilton, entièrement déterminée par la

donnée d'une observable particulière \mathcal{H} , le hamiltonien classique ou énergie du système. Plus précisément, la structure symplectique de l'espace des phases permet d'associer au hamiltonien classique \mathcal{H} un champ de vecteurs $X_{\mathcal{H}}$ sur M , appelé champ hamiltonien associé à \mathcal{H} , défini par $i(X_{\mathcal{H}})\omega = -d\mathcal{H}$

On pourra déterminer le mouvement en écrivant une équation différentielle pour chacune de ces coordonnées. En se limitant à des exemples simples on va définir pas à pas l'espace des phases d'un système physique.

5. Mécanique newtonienne

Le but de ce paragraphe est de présenter rapidement les bases de la mécanique classique. On se limitera à une particule.

5.1 Lois de Newton

La première loi de Newton consiste à affirmer l'existence de repères Galiléen c'est-à-dire dans lequel une particule soumise à aucune force à un mouvement rectiligne et uniforme.

Dans un repère galiléen, le mouvement d'une particule de masse m à la position r est régie

par la deuxième loi de Newton $\vec{F} = m\vec{\gamma}$ ou, plus précisément,

$$\overrightarrow{F(r, \partial_t r)} = \partial_t \overrightarrow{p} \quad (5.1)$$

Où \vec{F} est la force qui, en général, peut dépendre à la fois de la position r ainsi que la vitesse $\partial_t r$ (par exemple, les forces de frottement dépendent de $\partial_t r$) et $\vec{p} = m\overrightarrow{\partial_t r}$ est la quantité de mouvement.

L'équation (5.1) se réduit à $\vec{F} = m\vec{\gamma}$ si $\partial_t m = 0$. Mais si $m = m(t)$ (par exemple pour une fusée), c'est la formule (5.1) qui est correcte.

5.2 Energie

Nous définissons l'énergie cinétique T comme

$$T = \frac{1}{2} m (\partial_t r)^2 = \frac{m \cdot (\dot{r})^2}{2} \quad (5.2)$$

Supposons la masse constante. Nous pouvons calculer la variation de l'énergie cinétique

avec le temps $\frac{dT}{dt} = \frac{2m \cdot \dot{r} \cdot \ddot{r}}{2} = \dot{p} \cdot \dot{r} = F \cdot \dot{r}$.

Supposons que la particule se déplace de la position r_1 à l'instant t_1 à la position r_2 à

l'instant t_2 , alors la variation de l'énergie cinétique est donnée par:

$$T(t_2) - T(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dT}{dt} dt = \int_{t_1}^{t_2} F \cdot \partial_t r dt = \int_{r_1}^{r_2} F \cdot dr \quad (5.3)$$

Où l'expression finale avec l'intégration de la force sur le chemin s'appelle le travail de la force. Ainsi, nous voyons que le travail est égal à la variation de l'énergie cinétique.

A partir de maintenant, nous considérons un type de force particulier: les forces conservatrices. De telles forces ne dépendent que de la position et non pas de la vitesse et sont telles que le travail effectué est indépendant du chemin.

En particulier, pour un chemin fermé, le travail de la force est nul.

$$\oint F \cdot dr = 0 \Leftrightarrow \nabla F = 0 \quad (5.4)$$

Une propriété fondamentale de l'espace \mathcal{R}^3 implique que nous pouvons en déduire l'expression de la force :

$$F = -\nabla V(r) \text{ Avec nos notations cela donne } F = -u^\alpha \partial_\alpha V(r). \quad (5.5)$$

Pour un certain potentiel scalaire $V(r)$. Les systèmes qui admettent un potentiel sous cette forme comprennent des forces gravitationnelles, électrofaibles et fortes.

Lorsque nous avons une force conservatrice, cela implique nécessairement une loi de conservation de l'énergie. Pour le voir, revenir à l'équation (5.3) qui se lit maintenant

$$T(t_2) - T(t_1) = -\int_{r_1}^{r_2} \nabla V(r) \cdot dr = -V(t_2) + V(t_1) \quad (5.6)$$

Ce qui implique :

$$T(t_1) + V(t_1) = T(t_2) + V(t_2) = E \quad (5.7)$$

Donc $E = T + V$ est une constante du mouvement qui est l'énergie. Lorsque l'énergie ne dépend que de la position r et de l'impulsion p , elle correspond à \mathbf{H} l'hamiltonien du système.

6. Mécanique lagrangienne & Principe de moindre action (d'action extrémale)

6.1 Formules d'Euler Lagrange

L'approche consiste, pour un système donné, à construire un Lagrangien et faire dériver les équations du mouvement d'un principe d'action extrémale. On postule qu'il existe une fonction $L(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t)$ dite fonction de Lagrange ou lagrangien, homogène à une énergie, qui est telle que l'action $\mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} L(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) dt$ soit extrémale pour la trajectoire effectivement suivie par le système de t_1 à t_2 entre $q_\lambda(t_1)$ et $q_\lambda(t_2)$, valeurs initiales et finales des coordonnées généralisées : On a donc $\partial_\lambda \mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) - \partial_t \mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) = 0$. Nous considérons deux trajectoires possibles entre $q_\lambda(t_1)$ et $q_\lambda(t_2)$. L'une, que nous noterons $q_\lambda(t)$, est la trajectoire effectivement suivie. L'autre que nous appellerons "trajectoire variée", infiniment proche, correspond à chaque instant aux positions $q_\lambda(t) + \delta q_\lambda(t)$, où $\delta q_\lambda(t)$ est un accroissement infinitésimal de la position. Ces deux trajectoires doivent obéir aux mêmes conditions initiales et finales. On a donc $\delta q_\lambda(t_1) = \delta q_\lambda(t_2) = 0$. Nous supposerons que les $q_\lambda(t)$ et $\delta q_\lambda(t)$ sont deux fois différentiables. Le fait que les $q_\lambda(t)$ donnent la trajectoire effectivement suivie a pour conséquence que l'action S est extrémale sur cette trajectoire et ne varie donc pas au premier ordre dans les $\delta q_\lambda(t)$ quand on passe à la trajectoire variée.

Or la variation de l'action s'écrit:

$$\delta \mathcal{S}(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} (L(q_\lambda + \delta q_\lambda, \dot{q}_\lambda + \partial_t \delta q_\lambda, t) - L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)) dt$$

En développant L au premier ordre dans les $\delta q_\lambda(t)$, on a:

$$\delta \mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} \partial^\lambda L \delta q_\lambda + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\lambda} \frac{d\delta q_\lambda}{dt} dt$$

Nous intégrons les termes de la seconde somme par parties. On obtient alors:

$$\delta \mathcal{S}(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} \left[\partial_\lambda L - \frac{d\partial L}{dt \partial \dot{q}^\lambda} \right] \delta q^\lambda dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\lambda} \delta q^\lambda \right]_{t_1}^{t_2}$$

Les accroissements infinitésimaux $\delta q_\lambda(t)$ s'annulant aux extrémités de la trajectoire, le terme tout intégré est identiquement nul. La somme, elle, ne peut s'annuler pour des $\delta q_\lambda(t)$

arbitraires et indépendants que si les n équations différentielles:
$$\partial_\lambda L - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\lambda} = 0$$

$1 \leq \lambda \leq n$ sont simultanément vérifiées. (6.1)

Ce système différentiel avec les conditions aux limites (fournissant $2n$ conditions indépendantes) détermine complètement les n coordonnées généralisées indépendantes. Ces équations différentielles appelées équations de Lagrange sont du second ordre par rapport au temps puisque L dépend a priori des $\partial_t q_\lambda$.

6.2 Application à la mécanique classique

Pour la mécanique classique le lagrangien est défini par la différence entre l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle V . On va montrer, dans le cas où seule l'énergie cinétique dépend du temps, que l'on retrouve les équations dynamiques habituelles.

En coordonnées cartésiennes, le lagrangien d'une particule de masse m non relativiste dans un espace euclidien à trois dimensions s'écrit :

$$L(x_\lambda, \partial_t x_\lambda) = \frac{1}{2} m (\dot{x}_\lambda)^2 - V(x_\lambda)$$

Appliquons (6.1) il vient :

$$\partial_\lambda \left(\frac{1}{2} m (\dot{x}_\lambda)^2 - V(x_\lambda) \right) - \frac{d}{dt} \frac{\partial \left(\frac{1}{2} m (\dot{x}_\lambda)^2 - V(x_\lambda) \right)}{\partial \dot{x}_\lambda} = 0$$

Mais par hypothèse l'énergie cinétique ne dépend pas de la position et l'énergie potentielle ne dépend pas du temps, donc

$$\partial_\lambda (-V(x_\lambda)) - \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \frac{\partial (\dot{x}_\lambda)^2}{\partial \dot{x}_\lambda} \right) = 0$$

Dans un référentiel galiléen et lorsque la force dérive d'un potentiel on a le premier terme qui est la composante λ de la force et on peut écrire:

$$F_\lambda - \frac{m d \dot{x}_\lambda}{dt} = 0 \text{ Ce qui implique } F_\lambda = m \ddot{x}_\lambda.$$

7. Mécanique Hamiltonienne

On passe du formalisme lagrangien au formalisme hamiltonien en mécanique classique par l'utilisation de la transformée de Legendre.

Partons du lagrangien : $L(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t)$ qui est une fonction des coordonnées généralisées $q_\lambda(t)$, des vitesses généralisées $\dot{q}_\lambda(t)$ et du temps t .

Définissons p_λ , le moment généralisé associé à la coordonnée généralisée $q_\lambda(t)$ par :

$$p_\lambda = \frac{\partial L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)}{\partial \dot{q}_\lambda}$$

En coordonnées cartésiennes, les moments généralisés sont les moments linéaires, alors qu'en coordonnées polaires ils correspondent aux moments angulaires. Lorsque les coordonnées généralisées sont choisies arbitrairement, il n'est plus possible de donner une interprétation intuitive aux moments conjugués. On appelle espace des phases l'espace mathématique décrit par les $2n$ quantités $p_\lambda(t)$ et $q_\lambda(t)$.

On définit alors le hamiltonien, $\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)$, par :

$$\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) = \dot{q}_\lambda p^\lambda - L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) \quad (7.1)$$

Qui est la transformée de Legendre du lagrangien.

7.1 Équations canoniques de Hamilton

Sous forme différentielle, les deux membres de la définition de $\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)$ deviennent :

$$d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) = \partial_\lambda \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) dq^\lambda + \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial p_\lambda} dp^\lambda - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) dt \quad (7.2)$$

$$d\mathcal{H} = \dot{q}_\lambda dp^\lambda + p_\lambda \cdot d\dot{q}^\lambda - \partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) dq^\lambda - \frac{\partial L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)}{\partial \dot{q}_\lambda} d\dot{q}^\lambda - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) dt \quad (7.3)$$

Mais $p_\lambda = \frac{\partial L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)}{\partial \dot{q}_\lambda}$

Et donc $d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) = \dot{q}_\lambda dp^\lambda - \partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) dq^\lambda - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) dt$

En identifiant avec (7.2) on obtient:

$$\partial_\lambda \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) = -\partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)$$

$$\dot{q}_\lambda = \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial p_\lambda}$$

Comme les équations de Legendre $\partial_\lambda L - \frac{d\partial L}{dt\partial \dot{q}_\lambda} = 0$ se traduisent par

$$\partial_\lambda L - \frac{d}{dt} p_\lambda = \partial_\lambda L - \dot{p}_\lambda = 0 \quad (7.4)$$

On a donc:

$$\dot{p}_\lambda = -\partial_\lambda \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) \quad \text{De plus (7.3) devient}$$

$$\frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \dot{q}_\lambda \frac{dp_\lambda}{dt} - \partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) \frac{dq_\lambda}{dt} - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)$$

$$\frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \dot{q}_\lambda \dot{p}_\lambda - \partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) \dot{q}_\lambda - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)$$

$$\frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \dot{q}_\lambda (\dot{p}_\lambda - \partial_\lambda L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)) - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)$$

D'après (7.4) on obtient :

$$\frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \dot{q}_\lambda (\dot{p}_\lambda - \dot{p}_\lambda) - \partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t) = -\partial_t L(q_\lambda, \dot{q}_\lambda, t)$$

$$\text{Mais } \frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial p_\lambda} \dot{p}_\lambda + \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial q_\lambda} \dot{q}_\lambda + \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial t}$$

$$\frac{d\mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{dt} = \dot{q}_\lambda \dot{p}_\lambda - \dot{p}_\lambda \dot{q}_\lambda + \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial t}$$

On a finalement les équations de Hamilton:

$$\dot{p}_\lambda = -\partial_\lambda \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t) \quad ; \quad \dot{q}_\lambda = \frac{\partial \mathcal{H}(q_\lambda, p_\lambda, t)}{\partial p_\lambda} \quad ; \quad \partial_t \mathcal{H} = -\partial_t L \quad (7.5)$$

Les équations de Hamilton sont des équations différentielles du premier ordre ce qui signifie que l'évolution future du système est complètement spécifiée par l'état du système à un moment donné : la spécification des $2n$ quantités (p_λ, q_λ) au temps $t = t_0$ suffit à déterminer les fonctions du temps $p_\lambda(t)$ et $q_\lambda(t)$. Elles sont plus faciles à résoudre que les équations de Lagrange qui sont du second ordre. Un autre avantage de l'approche hamiltonienne est de fournir, un fondement théorique en mécanique qui peut se

généraliser, comme c'est le cas, par exemple, pour la mécanique quantique qui utilise un formalisme fondé sur celui de la mécanique hamiltonienne.

7.1.1 Exemple (simple) d'application

On considère une particule en mouvement, dans l'espace à trois dimensions et soumise à un potentiel V : le Lagrangien est :

$$L = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 - V(r)$$

On calcule le moment en dérivant par rapport à \dot{r}

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m \dot{r}$$

On en déduit le Hamiltonien

$$\mathcal{H} = p \cdot \dot{r} - L = \frac{1}{2m} p^2 + V(r) \quad \text{Où on a éliminé les } \dot{r}$$

Les équations d'Hamilton sont alors:

$$\dot{r} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{1}{m} p$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r} = -\nabla V$$

La première équation est la définition du moment en fonction de la vitesse et la deuxième équation est celle de Newton (5.5) pour ce système.

7.2 Crochet de Poisson

Étant données deux fonctions F et G sur l'espace des phases, on définit le crochet de Poisson $[F, G]$ comme

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial q_\lambda} \frac{\partial G}{\partial p^\lambda} - \frac{\partial F}{\partial p_\lambda} \frac{\partial G}{\partial q^\lambda} \quad (7.6)$$

On vérifie que

$$[F, G] = -[G, F] \quad (\text{Antisymétrie})$$

$$[F, aG + bH] = a[F, G] + b[F, H] \quad (\text{Linéarité})$$

$$[FG, H] = [F, H]G + F[G, H] \quad (\text{Différentiation d'un produit}) \quad (7.7)$$

$$[F, [G, H]] + [G, [H, F]] + [H, [F, G]] = 0 \quad (\text{Identité de Jacobi})$$

Les équations de Hamilton deviennent alors

$$\dot{p}_\lambda = [p_\lambda, \mathcal{H}] \text{ Et } \dot{q}_\lambda = [q_\lambda, \mathcal{H}]$$

À l'aide des équations de Hamilton, on montre que la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction $F(p_\lambda, q_\lambda, t)$ est

$$\dot{F} = [F, \mathcal{H}] + \partial_t F$$

Où le premier terme provient du déplacement dans l'espace des phases du point (p_λ, q_λ) où est évaluée la fonction F et le deuxième terme provient de la dépendance explicite de F sur le temps.

En supposant que la fonction F ne dépende pas explicitement du temps, elle sera conservée, c'est-à-dire constante lors de l'évolution temporelle du système, si son crochet de Poisson avec \mathcal{H} s'annule $[F, \mathcal{H}] = 0$.

Ceci est évidemment vrai de \mathcal{H} lui-même, d'où la conservation de l'énergie si \mathcal{H} ne dépend pas du temps.

Si \mathcal{H} ne dépend pas explicitement d'une coordonnée particulière q_λ alors le moment conjugué p_λ sera aussi conservé, comme il est évident d'après les équations de Hamilton.

La description donnée ci-dessus est faite en fonction de variables dites canoniques, à savoir les q_λ et p_λ . On peut toutefois décrire l'espace des phases à l'aide d'autres variables, canoniques ou non. L'important est la définition d'un crochet de Poisson $[F, H]$ satisfaisant aux propriétés (7.7) et d'un hamiltonien \mathcal{H} .

Cependant, si les variables sont canoniques, l'expression explicite du crochet de Poisson prend la forme simple (7.6) et on a

$$[q_\lambda, p_\eta] = \partial_{\lambda\eta} ; [p_\lambda, p_\eta] = [q_\lambda, q_\eta] = 0$$

Comme conséquence si on trouve une fonction $I(p_\lambda, q_\lambda)$ qui satisfasse

$$[I, \mathcal{H}] = 0$$

On dit que I et \mathcal{H} commutent au sens de Poisson et I est une constante du mouvement.

Si par exemple \mathcal{H} est indépendant de la coordonnée q_λ alors

$$[p_\lambda, \mathcal{H}] = 0$$

Ce qui permet de voir la relation entre une coordonnée sans interaction et une quantité conservée dans le langage des crochets de Poisson.

On notera que si I et J sont des constantes du mouvement alors

$[[I, J], \mathcal{H}] = [I, [J, \mathcal{H}]] + [[I, \mathcal{H}], J] = 0$ Ce qui signifie que le crochet $[I, J]$ est aussi une constante du mouvement. On dit que les constantes du mouvement forment une algèbre fermée pour le crochet de Poisson.

7.3 Principe d'action extrémale

Au paragraphe (5.1) nous avons exprimé un tel principe d'un point de vue Lagrangien, pour cela nous avons exprimé l'action avec la formule suivante:

$$\mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} L(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) dt$$

L'utilisation du formalisme hamiltonien entraîne

$$\mathcal{S}(q_\lambda, \partial_t q_\lambda, t) = \int_{t_1}^{t_2} (p^\lambda \dot{q}_\lambda - \mathcal{H}) dt$$

Dans le formalisme hamiltonien les variables p^λ et q_λ jouent un rôle symétrique il faudra donc les faire varier toutes les deux indépendamment alors que dans le formalisme Lagrangien une variation de q_λ entraînait celle de \dot{q}_λ . Donc on a

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{S} &= \int_{t_1}^{t_2} (\delta p^\lambda \dot{q}_\lambda + p^\lambda \delta \dot{q}_\lambda - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p^\lambda} \delta p_\lambda - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\lambda} \delta q_\lambda) dt \\ \delta \mathcal{S} &= \int_{t_1}^{t_2} (\delta p^\lambda (\dot{q}_\lambda - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\lambda}) + \delta q_\lambda (-\dot{p}^\lambda - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\lambda})) dt + [p^\lambda \delta q_\lambda]_{t_1}^{t_2} \end{aligned} \quad (7.8)$$

Comme on recherche un extrema on a $\delta \mathcal{S} = 0$ et on retrouve les équations de Hamilton

$$\dot{q}_\lambda - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\lambda} = 0 \text{ et } \dot{p}^\lambda + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\lambda} = 0 \text{ sauf que les conditions pour annuler le dernier terme de}$$

(7.8) diffèrent de celles qu'on a rencontrées dans le formalisme Lagrangien: Il suffit en effet que $\delta q_\lambda(t_1) = \delta q_\lambda(t_2) = 0$ et il n'y a aucune conditions sur les δp_λ . Donc, bien qu'on ait fait des efforts pour l'éviter, il reste une différence de traitement entre les coordonnées q_λ et les p_λ . On peut arbitrairement imposer que $\delta p_\lambda(t_1) = \delta p_\lambda(t_2) = 0$ pour symétriser le traitement des deux types de coordonnées : l'action resterait extrémale en considérant des trajectoires à la définition plus restrictive.

7.4 Structure symplectique et transformations canoniques

7.4.1 Définition

Dans un espace vectoriel, le choix d'un produit scalaire définit une structure euclidienne, permettant par exemple définir les distances ou les projections orthogonales. De façon similaire, le crochet de Poisson dote l'espace des phases, qui est un espace vectoriel de dimension paire, d'une structure géométrique dite symplectique.

Il existe à la fois des analogies et des différences entre ces deux types de géométrie, car le produit scalaire est une forme bilinéaire symétrique, et le crochet de Poisson est une "opération" bilinéaire antisymétrique et s'apparente donc davantage au produit vectoriel.

Quelle que soit l'espace de configuration on peut toujours lui associer un espace des phases qui est le fibré cotangent de l'espace de configuration et qui est muni d'une structure symplectique canonique.

Cette structure symplectique sera par exemple caractérisée, dans un jeu de coordonnées donné, par les relations de conjugaison canoniques :

$$[q_\lambda, p_\eta] = \delta_{\lambda\eta} ; [p_\lambda, p_\eta] = [q_\lambda, q_\eta] = 0$$

7.4.2 Flot

Le flot est, en mathématiques, est un concept utilisé en géométrie différentielle. Il est associé à la notion de champ de vecteurs, c'est-à-dire à une application f , qui à un point x d'un ouvert Ω d'un espace de Banach E , associe un vecteur de E . Un tel champ définit une équation différentielle du type $\alpha'(t) = f(\alpha(t))$. (7.9)

C'est-à-dire que le vecteur dérivé en chaque point est donné par le champ en ce point.

Si la fonction f est localement lipchitzienne, pour chaque point x de U , il existe un intervalle réel maximal et une fonction α_x , définie sur l'intervalle maximal, solution de (7.9) et avec la condition dite de Cauchy $\alpha_x(0) = x$. Vue comme une fonction de deux variables, t et x , l'application α est appelée le flot du champ f de vecteurs. Cette définition se généralise dans le cas d'un champ de vecteurs temporel (c'est-à-dire dépendant d'une variable t qui prend ses valeurs dans \mathcal{R}) et dépendant d'un paramètre λ . Le flot et le champ de vecteurs deviennent des fonctions de trois variables t , x et λ .

Si le champ de vecteurs f est régulier, le flot est le support de plusieurs théorèmes de la théorie des équations différentielles. Si la fonction f est de classe C^p le flot l'est aussi. Ce résultat est parfois considéré comme une forme avancée du théorème de Cauchy-Lipchitz. Si la fonction f ne dépend pas du temps, le théorème du redressement du flot indique que, localement, le champ de vecteurs est équivalent à un champ constant et cette équivalence transforme le flot en une fonction qui à (x, t) associe $x + t.v$, si v est l'unique image du champ constant.

7.4.3 Structure symplectique de l'espace de phase

L'intérêt de la géométrie symplectique est d'achever et de systématiser l'approche qui consiste à traiter de façon similaire les différentes coordonnées, qu'il s'agisse de positions ou d'impulsions. Pour ce faire, la première condition est de donner au crochet de Poisson lui-même une forme plus symétrique, ce qui peut être fait en écrivant :

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial q_\lambda} \frac{\partial G}{\partial p^\lambda} - \frac{\partial F}{\partial p_\lambda} \frac{\partial G}{\partial q^\lambda}$$

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial q_\lambda} \frac{\partial G}{\partial p^\mu} [q_\lambda, p^\mu] + \frac{\partial F}{\partial p_\lambda} \frac{\partial G}{\partial q^\mu} [p_\lambda, q^\mu]$$

Et si l'on introduit une notation commune x_ν pour les 2d coordonnées de l'espace des phases :

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial x_\nu} \frac{\partial G}{\partial x^\nu} [q_\nu, p^\nu] = \partial_\nu F \partial^\nu G S_\nu^\nu = \frac{\partial F}{\partial x} S \frac{\partial G}{\partial x}$$

Puisque les termes où les deux dérivées sont faites par rapport à q ou par rapport à p donnent des contributions nulles. Les coefficients $S_\nu^\nu = [x_\nu, x^\nu]$ sont les éléments de la matrice :

$$\begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix} \text{ où } I_d \text{ est la matrice identité } (d \times d). \quad (7.10)$$

Cette matrice vérifie les relations :

$${}^t S = -S ; S^2 = -I_{2d} \text{ D'où } S^{-1} = {}^t S = -S \text{ et } \det S = 1$$

Si maintenant on considère un élément F quelconque de l'espace des phases d'un système, son évolution temporelle définit un champ de vecteur $F_t : t \longrightarrow F(q_\lambda, t)$ et le flot correspondant α est défini à l'aide de S par $\alpha = S \frac{\partial F}{\partial x}$. Bien sûr ce résultat s'applique aussi à l'Hamiltonien \mathcal{H} .

On peut vouloir aller plus loin dans la généralisation et étudier tous les espaces munis d'une structure symplectique. Le passage des espaces de phases aux variétés symplectiques générales est une grande généralisation mais on peut montrer qu'une variété symplectique ressemble toujours localement à un espace de phases. C'est le théorème de Darboux : au voisinage de n'importe quel point, toute variété symplectique peut être paramétrée par un espace des phases de sorte que toute surface assez petite se voit attribuer le même nombre par la structure symplectique donnée et par la structure symplectique de l'espace des phases.

7.4.4 Transformations canoniques

La structure symplectique ne dépend pas du choix des variables canoniques utilisées. Nous allons introduire des transformations respectant la structure symplectique, dites transformations canoniques, qui seront caractérisées par la propriété de conserver les crochets de Poisson. L'intérêt de ces transformations est qu'elles permettent de réaliser des changements de coordonnées, beaucoup plus généraux que les "transformations ponctuelles" utilisées dans le point de vue de Lagrange.

Soit donc une transformation de l'espace des phases $x \rightarrow X(x, t)$, supposée bijective. Pour que cette transformation soit une transformation canonique, elle doit vérifier, à chaque instant t :

$$[X_i, X_j] = S_{i,j} = \partial_k X_i \partial_l X_j S^{kl}$$

Ce qui peut être mis sous la forme matricielle, dite "condition symplectique" :

$$J \cdot S \cdot {}^t J = S \quad (7.11)$$

Où J est la matrice jacobienne de la transformation, définie par $J_i^j = \partial^j X_i$.

Lorsque cette condition est réalisée, on a pour toutes fonctions f et g de l'espace des phases :

$$[f, g] = \partial_k f \partial_l g [x^k, x^l] = \frac{\partial f}{\partial X_i} J_k^i \frac{\partial g}{\partial X_j} J_l^j [x^k, x^l] = \frac{\partial f}{\partial X_i} \frac{\partial g}{\partial X_j} [X^i, X^j]$$

Qui est l'expression du crochet de Poisson dans les nouvelles coordonnées.

Exemples élémentaires

1. Des changements d'échelle : $[q_\lambda, p_\mu] \rightarrow [Q_\lambda, P_\mu] = [\alpha q_\lambda, p_\mu / \alpha]$
2. Des échanges entre positions et impulsions : $[q_\lambda, p_\mu] \rightarrow [Q_\lambda, P_\mu] = [p_\lambda, -q_\mu]$
3. Toutes les transformations ponctuelles, pour lesquelles la matrice J prend la forme :

$$J = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & {}^t D^{-1} \end{pmatrix} \text{ avec } D^{ij} = \frac{\partial Q^i}{\partial q^j}$$

Les cas 1 et 3 ne tirent pas réellement parti de la puissance du formalisme, puisqu'elles ne mélangent pas les impulsions et les positions, et auraient pu être faites dans le cadre lagrangien.

Notons que pour les cas 1 et 2, le changement d'échelle ou l'échange peut, bien sûr, ne concerner que certaines paires de variables conjuguées.

Propriétés des transformations canoniques

La matrice S définie en (7.10) possède les propriétés suivantes :

$$S^2 = -I_d \text{ D'où } {}^t S = -S \quad S^{-1} = {}^t S = -S \text{ et } \det S = 1$$

Il en découle de nombreuses propriétés des transformations canoniques. En premier lieu, l'équation (7.11) entraîne les relations :

$$\det J = \pm 1 \text{ et } J^{-1} = -S \cdot {}^t J \cdot S$$

Si on décompose la matrice J en blocs, et que l'on explicite $J = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$, il vient

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} {}^t D & -{}^t B \\ -{}^t C & {}^t A \end{pmatrix} \text{ qui a donc exactement la structure que l'on aurait si les blocs A; B; C;}$$

et D étaient de simples nombres !

L'équation (7.11) entraîne encore les égalités :

$$A^t B = B^t A ; C^t D = D^t C \text{ et } D^t A - C^t B = I_d .$$

Dans le formalisme hamiltonien, les définitions des nouvelles positions et des nouvelles impulsions font intervenir les anciennes positions et impulsions q_λ et p_λ . Ce changement de variables doit être inversible, pour que l'état du système soit déterminé de façon univoque par les nouvelles coordonnées, ce qui impose que les Q_λ et P_λ soient indépendantes. Pour que ce changement de variable soit utilisable il faut cependant qu'il existe un nouveau hamiltonien $\mathcal{H}'(Q_\lambda, P_\lambda, t)$ qui donne les équations de Hamilton pour les nouvelles variables. On peut montrer que c'est une façon équivalente de définir une transformation "canonique" et que toute fonction F telle que :

$$\frac{\partial F}{\partial q_\lambda} = p_\lambda, \quad \frac{\partial F}{\partial Q_\lambda} = -P_\lambda, \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

Permet de générer une transformation canonique avec un hamiltonien connu : F s'appelle la fonction génératrice. Il y a trois relations analogues qui permettent de générer des transformations canoniques suivant le même principe:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial q_\lambda} = p_\lambda, \quad \frac{\partial G}{\partial P_\lambda} = Q_\lambda, \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial G}{\partial t} \\ \frac{\partial H}{\partial p_\lambda} = -q_\lambda, \quad \frac{\partial H}{\partial Q_\lambda} = -P_\lambda, \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial H}{\partial t} \\ \frac{\partial K}{\partial p_\lambda} = -q_\lambda, \quad \frac{\partial K}{\partial P_\lambda} = Q_\lambda, \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial K}{\partial t} \end{aligned}$$

La donnée au choix de l'une de ces quatre fonctions détermine donc complètement une transformation canonique. Si la fonction génératrice ne fait pas intervenir explicitement le temps, les fonctions de Hamilton coïncident dans les anciennes et les nouvelles représentations.

7.4.5 Le théorème de Liouville

L'état mécanique du système est complètement décrit par la donnée des n q_λ et des n p_λ . Autrement dit, le système est décrit comme un point dans un espace à $2n$ dimensions que l'on appelle espace des phases. Cet espace joue un grand rôle en physique statistique. L'entropie, par exemple, peut être définie comme le logarithme du nombre de configurations accessibles au système. Compter ce nombre de configurations, c'est compter la surface de

l'espace des phases correspondant à un petit intervalle d'énergie. L'espace des phases joue également un rôle important dans l'étude de la dynamique complexe des systèmes. Un point d'équilibre stable correspond à un point dans l'espace des phases, un mouvement périodique à une trajectoire fermée simple, un mouvement chaotique à une trajectoire complexe parcourant rapidement tout le domaine accessible.

Les transformations canoniques transforment un espace des phases en un autre. La géométrie de cette transformation n'est pas complètement arbitraire, en raison des contraintes imposées aux transformations canoniques. La propriété essentielle est qu'une transformation canonique conserve le volume dans l'espace des phases. Si on considère un domaine V de l'espace des phases des "anciennes coordonnées", il lui correspond un domaine V_0 dans le nouvel espace. Pour une transformation canonique, le volume de V est égal au volume de V_0 .

Nous allons considérer une transformation canonique particulière qui fait correspondre deux états du système à deux instants différents. Soit un système ayant un lagrangien indépendant du temps (l'énergie totale est donc conservée) dont la dynamique est décrite par la donnée des n q_λ et des n p_λ et considérons le changement de variables défini par $p_\lambda(t) \rightarrow P_\lambda(t) = p_\lambda(t + T)$ et $q_\lambda(t) \rightarrow Q_\lambda(t) = q_\lambda(t + T)$

Où T est une durée fixe. Cette correspondance entre états du système à des instants différents est évidemment une transformation canonique, puisque les nouvelles variables obéissent aux mêmes équations du mouvement que les anciennes. Nous allons voir que la fonction génératrice de cette transformation n'est autre que l'action. Considérons en effet la trajectoire du système entre les instants t et $t + T$ et une trajectoire infiniment voisine obtenue en modifiant les coordonnées aux points de départ et d'arrivée de quantités infinitésimales. Nous pouvons écrire la variation de l'action entre ces deux trajectoires comme:

$$dS = p_\lambda(t + T)dq^\lambda(t + T) - p_\lambda(t)dq^\lambda(t)$$

Ou encore

$$dS = P_\lambda(t)dQ^\lambda(t) - p_\lambda(t)dq^\lambda(t)$$

Cette expression de la différentielle de l'action, que nous pouvons considérer comme une fonction des coordonnées des points de départ et d'arrivée $S(q_\lambda, Q_\lambda)$, prouve que:

$\frac{\partial S}{\partial Q_\lambda} = P_\lambda$ et $\frac{\partial S}{\partial q_\lambda} = -p_\lambda$. S est donc bien fonction génératrice de la transformation des q_λ

en Q_λ . Cette transformation joue un grand rôle dans la méthode de Hamilton-Jacobi, essentielle pour la résolution de problèmes complexes, et conduisant à la notion importante de séparabilité des variables.

Considérons un domaine V de l'espace des phases du système. On peut considérer l'ensemble des trajectoires originaires d'un point situé à l'instant t à l'intérieur de ce domaine. Par continuité, ces trajectoires correspondent à l'instant $t + T$ à des points situés dans un nouveau domaine V_0 de l'espace des phases. Comme la transformation faisant se correspondre les instants t et $t + T$ est canonique, l'étendue du domaine V_0 est égale à celle du domaine V . Cette propriété constitue le théorème de Liouville: Le volume du domaine occupé dans l'espace des phases par un ensemble de trajectoires se conserve au cours du temps.

Ce théorème joue évidemment un rôle important en mécanique statistique. Il prédit, par exemple, la conservation de l'entropie dans une évolution hamiltonienne. Notons que ce théorème ne tient pas en présence de dissipation. N'importe quelle condition initiale conduit en effet à un état de repos où les coordonnées n'évoluent plus. Soulignons aussi le lien entre ce théorème et le théorème de conservation de l'étendue en optique. L'étendue joue le rôle du volume dans un espace des phases.

7.5 Etats et observables classiques

7.5.1 Changement de variable

Sur une variété M , soit X un champ de vecteurs et g une fonction différentiable sur M partout non nulle. On considère les deux équations différentielles:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = g(\varphi(t))X(\varphi(t)) \quad (7.12)$$

$$\frac{d\psi(s)}{ds} = X(\psi(s)) \quad (7.13)$$

Soit $\sigma : \mathcal{R} \times M \rightarrow \mathcal{R}$ une fonction telle que pour chaque solution φ de (7.12)

$$\frac{d}{dt}\sigma(t, \varphi(t)) = g(\varphi(t)) \quad (7.14)$$

Pour chaque solution $\varphi : I_\varphi \rightarrow M$, I_φ intervalle ouvert de \mathcal{R} , soit $\sigma_\varphi(t) = \sigma(t, \varphi(t))$ alors $\sigma_\varphi : I_\varphi \rightarrow \sigma_\varphi(I_\varphi)$ est un difféomorphisme et l'application $s \rightarrow \psi(s) = \varphi \circ \sigma_\varphi^{-1}(s)$ est une solution de l'équation différentielle (7.13).

On a juste exprimé la règle permettant le changement de variable (remplacement de t par s) dans une équation différentielle.

7.5.2 Champ Hamiltonien

Soit (M, ω) ou M est une variété différentielle connexe et ω est une 2-forme différentielle fermée ($d\omega = 0$), (M, ω) est une variété symplectique, considérons $H : M \rightarrow \mathcal{R}$ une fonction différentiable. Le champ de vecteurs X_H tel que $i(X_H)\omega = -dH$, où i est le produit intérieur, est dit champ hamiltonien associé à H , et H est appelé son hamiltonien. Cette description rejoint celle qu'on avait donnée en 4.2.3

L'équation différentielle de Hamilton s'écrit alors:

$$\frac{dz(t)}{dt} = X_{\mathcal{H}}(z(t))$$

En coordonnées locales canoniques $(q_1, \dots, q_\lambda, p_1, \dots, p_\lambda)$, telles que la forme symplectique ω ait pour expression locale

$$\omega = dp_\lambda \wedge dq^\lambda$$

L'équation de Hamilton s'explique selon (7.5)

$$\dot{p}_\lambda = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\lambda} \quad ; \quad \dot{q}_\lambda = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\lambda}$$

Soit $f \in C^\infty(M, \mathcal{R})$ une observable classique, et $z : t \rightarrow z(t) = (q_\lambda(t), p_\lambda(t))$ une solution de l'équation de Hamilton. La dérivée par rapport au temps de la valeur $f(z(t))$ de l'observable f , lorsque l'état $z(t)$ du système varie en obéissant à l'équation différentielle de Hamilton, est $d_t(f(z(t))) = \langle df, X_{\mathcal{H}} \rangle(z(t)) = [\mathcal{H}, f](z(t))$ où $[\mathcal{H}, f]$ est le crochet de Poisson des observables \mathcal{H} et f .

Afin de faciliter la comparaison de cette équation d'évolution d'une observable classique avec l'équation d'évolution d'une observable quantique établie plus loin, nous allons mettre cette équation sous une forme plus commode, en faisant intervenir le flot réduit Φ_t du champ de vecteurs $X_{\mathcal{H}}$. Nous pouvons alors écrire $d_t(\Phi_t^* f) = \Phi_t^*[\mathcal{H}, f] = [\mathcal{H}, \Phi_t^* f]$

Car $\Phi_t^*(\mathcal{H}) = \mathcal{H}$ (l'énergie est une intégrale première de $X_{\mathcal{H}}$), et le tenseur de Poisson est lui aussi invariant par le flot Φ_t .

7.5.3 Mécanique statistique

En Mécanique statistique classique, on utilise, pour représenter un système, un espace des phases qui est une variété symplectique, c'est le même espace des phases que celui utilisé pour la mécanique classique. Un état du système est une mesure de probabilité μ sur l'espace des phases. Une observable est une fonction f , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable f lorsque l'état du système est μ est une variable aléatoire dont la loi de probabilité est la mesure image $f * \mu$. Lorsque cette mesure est une mesure de Dirac δ_z concentrée en un point z de l'espace des phases, on retrouve comme cas particulier la situation considérée en Mécanique classique.

L'évolution de l'état du système au cours du temps est, comme précédemment, décrite par l'équation différentielle de Hamilton, entièrement déterminée par la donnée du hamiltonien classique (ou énergie) du système.

7.6 Mécanique Quantique

En Mécanique quantique, on utilise encore les notions d'état et d'observable, et lorsque le système est dans un état donné, la valeur prise par l'observable est encore une variable aléatoire. Mais sa loi de probabilité n'est plus la mesure image, par une fonction, définie sur un espace des phases, représentant l'observable, d'une mesure représentant l'état du système.

En Mécanique quantique, à un système physique est associé un espace de Hilbert complexe \mathbf{H} . Un état pur du système est un sous-espace vectoriel de dimension 1 de \mathbf{H} ; un représentant de cet état est un élément non nul ψ de ce sous-espace vectoriel, qu'on peut toujours choisir de norme 1. Une observable est un opérateur auto-adjoint A , pas nécessairement borné, sur \mathbf{H} .

On définit alors une mesure spectrale qui est une application définie sur une tribu \mathcal{A} et à valeurs dans l'espace des projections orthogonales d'un espace hilbertien et vérifiant des axiomes semblables à ceux qui définissent les mesures positives.

Soit (X, \mathcal{A}) un espace mesurable, c'est-à-dire un ensemble X muni d'une tribu \mathcal{A} . Une mesure spectrale, aussi appelée homomorphisme spectral, est une application φ définie sur l'algèbre \mathcal{M} des fonctions complexes mesurables bornées sur X ayant les propriétés suivantes :

1. φ est un morphisme involutif de l'algèbre \mathcal{M} dans l'algèbre involutive des opérateurs bornés dans un espace hilbertien \mathbf{H}
2. Si $(\phi, \psi) \rightarrow \langle \phi | \psi \rangle$ est la forme sesquilinéaire qui définit la structure hilbertienne de \mathbf{H} et si $\psi \in \mathbf{H}$, alors la fonction d'ensemble $\nu(B) = \langle \varphi(B)\psi | \psi \rangle$ est une mesure à valeurs complexes.

Si on prend $X = \mathcal{R}$ et \mathcal{A} la tribu de Borel de \mathcal{R} , le théorème spectral permet d'associer à chaque opérateur auto-adjoint A sur \mathbf{H} une mesure P^A définie sur la tribu \mathcal{A} et à valeurs dans l'espace des projections dans \mathbf{H} qui associe, à chaque partie borélienne B de \mathcal{R} , un opérateur de projection dans \mathbf{H} noté P_B^A .

La probabilité pour que la mesure de l'observable A , lorsque le système est dans l'état pur représenté par le vecteur unitaire ψ de \mathbf{H} , donne un résultat appartenant au borélien B de \mathcal{R} , est $\langle P_B^A(\psi) | \psi \rangle$.

Donc on est arrivé à avoir une mesure comme dans le cas de la mécanique statistique. Mais pourquoi est-on conduit à faire une telle construction? La justification ultime c'est que la théorie reproduise les résultats des expériences, mais pourquoi la construction est-elle si compliquée? Cette construction permet d'abord d'avoir un homomorphisme entre l'algèbre de Lie $C^\infty(M, \mathcal{R})$ muni de son crochet de poisson et qu'on utilise dans le formalisme Hamiltonien de la mécanique classique d'une part, et une algèbre de Lie d'opérateur auto adjoint sur \mathbf{H} d'autre part.

Bien que les opérateurs bilinéaires et anti symétriques de \mathbf{H} agissent sur un espace très différent de celui sur lequel agissent les fonctions du crochet de poisson, la structure

algébrique sous jacente est la même, ce qui permet de définir un procédé pour passer de la mécanique classique à la mécanique quantique.

$$[,]_{poisson} \leftrightarrow -\frac{i}{\hbar} [,]_{quantique}$$

Ce procédé s'appelle la quantification canonique.

On en déduit immédiatement $\dot{f} = [f, \mathcal{H}]_{poisson} \leftrightarrow i\hbar\dot{\hat{f}} = [\hat{f}, \hat{H}]_{quantique}$

En mécanique quantique, lorsque la valeur d'un degré de liberté est connu avec précision, la dérivée par rapport au temps de ce degré de liberté est indéterminée et réciproquement. Un système quantique n'a donc pas de représentation localisable sur une trajectoire dans un espace des phases! Pour résoudre cette difficulté, l'espace de Hilbert que l'on utilise n'est plus un espace de points mais un espace fonctionnel.

Le fait qu'on ait des opérateurs est important, en effet, dans le cas général le produit de deux opérateurs n'est pas commutatif ce qui se traduit par un commutateur différent de 0. Or les grandeurs que l'on peut mesurer précisément sont celles qui impliquent une mesure qui ne change pas l'état du système c'est-à-dire que le vecteur qui représente cet état doit rester dans le même sous espace vectoriel de dimension 1. Il faut pour cela que l'opérateur ait des valeurs propres, et que ces valeurs soient réelles (car les mesures sont des nombres réels). Mais on voit bien que dans le cas général les opérateurs n'ont pas les mêmes vecteurs propres et valeurs propres et donc si ils laissent inchangé un vecteur d'état, ils vont modifier l'autre, sauf si ils ont les mêmes vecteurs propres, et cela est satisfait quand le commutateur entre ces opérateurs est nul.

Un champ c'est lorsqu'on a un nombre infini de degrés de liberté, c'est pourquoi on ne peut pas se contenter d'espace vectoriel fini pour la généralisation de l'espace des phases. En plus on prend un espace de Hilbert afin qu'il soit complet (les séries convergentes convergent vers un élément de l'espace bien que ce ne soit pas en général un polynôme (qui lui appartiendrait à l'espace vectoriel)).

7.6.1 Représentation

Si deux opérateurs commutent, les vecteurs propres de l'un sont les vecteurs propres de l'autre. Dans ce cas, on peut dire qu'ils sont compatibles, c'est-à-dire qu'on peut mesurer les observables qu'ils représentent dans le même état. Maintenant supposons que deux observables aient des opérateurs incompatibles, comme par exemple la position q et l'impulsion p d'une particule, on a donc \hat{q} et \hat{p} qui ne commutent pas. Un vecteur propre

de \hat{q} par exemple représente un état dans lequel la position peut être mesurée avec précision. Mais ce vecteur propre n'est pas un vecteur propre de \hat{p} : l'action de \hat{p} sur ce vecteur le transforme en un autre vecteur qui n'est pas colinéaire avec lui, cela veut dire qu'on ne peut pas mesurer l'impulsion dans un état qui permet de mesurer la position et réciproquement. C'est de là que viennent les inégalités de Heisenberg dans le formalisme qu'on vient de décrire.

Une représentation est définie par un ensemble complet d'observables dont les opérateurs commutent. Les vecteurs propres communs à ces observables définissent une base de l'espace de Hilbert qui est elle aussi complète: cela veut dire que l'amplitude d'état de tout état possible du système peut être une combinaison linéaire des vecteurs de la base. Une représentation est donc déterminée par un ensemble complet d'observables qui commutent entre elles, fournissant toute l'information qu'il est possible de recueillir sur un système quantique. Mais contrairement aux systèmes classique il est possible qu'il y ait une autre représentation de ce même système, c'est-à-dire un autre système complet d'observables qui commutent entre elles tout en ne commutant pas avec les observables de la première représentation. On dit alors que les deux représentations sont complémentaires.

- L'équation de Schrödinger est une équation de diffusion avec une constante de diffusion imaginaire. http://en.wikipedia.org/wiki/Path_integral_formulation
- Page 159

Références :

- [Géométrie différentielle appliquée à la physique Cours M2 - Lyon 1 - automne 2010](#)
- [Etude des perturbations cosmologiques et dérivation des observables en Gravit  Quantique à Boucles](#)
- [Forme lagrangienne de la m canique quantique](#)
- [Physique Math matique](#)
- [Quantification-geometrique-theorie-et-exemples](#)
- [M canique analytique](#)
- [Classical Dynamics University of Cambridge Part II Mathematical Tripos](#)
- [Covariant Loop Quantum Gravity](#)