

La conjecture d'unique ergodicité quantique

Écrit par Jason Garnier & Titouan Mousset

Publié le 9 octobre 2024

DOI : 10.60868/ey52-3e40 — CC BY-NC-ND 4.0

1/1 — 30 min

SYSTÈMES DYNAMIQUES THÉORIE DU CHAOS

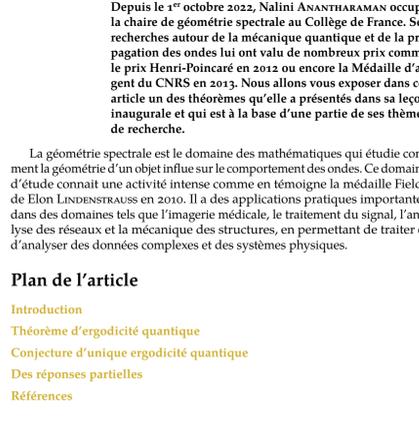


FIGURE 1 – Images de plaques de Chladni à diverses fréquences

Depuis le 1^{er} octobre 2022, Nalini ANANTHARAMAN occupe la chaire de géométrie spectrale au Collège de France. Ses recherches autour de la mécanique quantique et de la propagation des ondes lui ont valu de nombreux prix comme le prix Henri-Poincaré en 2012 ou encore la Médaille d'argent du CNRS en 2013. Nous allons vous exposer dans cet article un des thèmes de recherche qu'elle a présentés dans sa leçon inaugurale et qui est à la base d'une partie de ses thèmes de recherche.

La géométrie spectrale est le domaine des mathématiques qui étudie comment la géométrie d'un objet influe sur le comportement des ondes. C'est un domaine d'étude qui connaît une activité intense comme en témoigne la médaille Fields de Elon LINDENSTRAUSS en 2010. Il a des applications pratiques importantes dans des domaines tels que l'imagerie médicale, le traitement du signal, l'analyse des réseaux et la mécanique des structures, en permettant de traiter et d'analyser des données complexes et des systèmes physiques.

Plan de l'article

- Introduction
- Théorème d'ergodicité quantique
- Conjecture d'unique ergodicité quantique
- Des réponses partielles
- Références

Introduction

Un des objets de base de la mécanique quantique est la fonction d'onde. Nous expliquerons par la suite ce qu'est une fonction d'onde. Son étude se replace dans le cadre plus général de la mécanique ondulatoire étudiant l'évolution des ondes. Afin de mieux comprendre le monde ondulatoire quantique, nous allons tout d'abord examiner une expérience du XIX^e siècle quelque peu étonnante.

Les plaques de Chladni

Avez-vous déjà entendu parler des figures de Chladni ? L'expérience montre que lorsque l'on fait vibrer à certaines fréquences une plaque soustraite de sable, celui-ci « dessine » des formes géométriques sur la plaque.

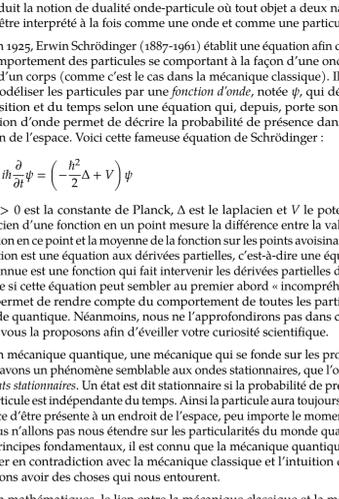


FIGURE 2 – Différentes figures de Chladni pour des fréquences propres de plus en plus élevées

Qu'est-ce qui explique un tel phénomène ? En changeant la fréquence de vibration on peut faire apparaître différentes figures de sable sur la plaque. Attention, les figures n'apparaissent pas pour toutes les fréquences mais seulement pour des fréquences dites de *résonance* ou *propres*. Ces fréquences correspondent à l'apparition d'ondes stationnaires qui sont *indépendantes du temps*. Ainsi, le sable va se déplacer vers les endroits où les vibrations des ondes stationnaires sont des moindres fortes, voire nulles, créant ainsi ces figures géométriques qui restent *inchangées* au cours du temps à fréquence fixée. On dit que les figures représentent les *modes de vibration* ou *modes propres* de la plaque. À une plaque donnée, pour chaque fréquence propre, on peut lui associer son (ou ses) mode propre. La plus basse fréquence propre est appelée *fréquence fondamentale*. Les autres sont des multiples de celle-ci : il existe donc une infinité de modes propres. En changeant les caractéristiques de la plaque, on change aussi ses modes propres. On remarque sur la figure 2 que plus la fréquence augmente plus les dessins sont complexes et remplissent l'espace.

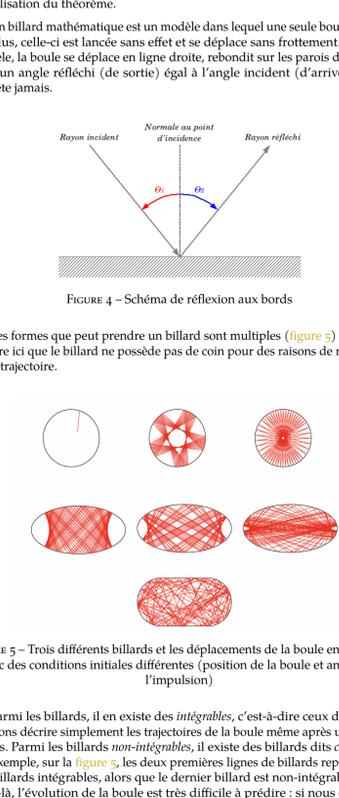


FIGURE 3 – Visualisation des nœuds et des ventres de la corde de Melde à diverses fréquences propres

Lien avec la mécanique quantique

Dans les années 1900, une nouvelle théorie physique a vu le jour : la mécanique quantique. Cette théorie bouleverse toute la physique de par son originalité et révolutionna le regard que l'on portait sur le monde. En effet, si la physique classique se fondait sur un pré-supposé déterministe, la physique quantique a apporté au sein du monde des incertitudes intrinsèques et, ce faisant, devint une physique probabiliste. De plus, la mécanique quantique a introduit la notion de dualité onde-particule où tout objet a deux natures : il peut être interprété à la fois comme une onde et comme une particule.

En 1925, Erwin Schrödinger (1887-1961) établissant une équation afin de décrire le comportement des particules se comportant à la façon d'une onde et non plus d'un corps (comme c'est le cas dans la mécanique classique). Il proposa de modéliser les particules par une *fonction d'onde*, notée ψ , qui dépend de la position et du temps selon une équation qui, depuis, porte son nom. La fonction d'onde permet de décrire la probabilité de présence dans chaque région de l'espace. Voici cette fameuse équation de Schrödinger :

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V \right) \psi$$

Ici $\hbar > 0$ est la constante de Planck, Δ est le laplacien et V le potentiel. Le laplacien d'une fonction en un point mesure la différence entre la valeur de la fonction en ce point et la moyenne de la fonction sur les points avoisinants. Cette équation est une équation aux dérivées partielles, c'est-à-dire une équation où l'inconnue est une fonction qui fait intervenir les dérivées partielles de celle-ci. Même si cette équation peut sembler au premier abord « incompréhensible », elle permet de rendre compte du comportement de toutes les particules du monde quantique. Néanmoins, nous ne l'approfondirons pas dans cet article, nous vous la proposons afin d'éveiller votre curiosité scientifique.

En mécanique quantique, une mécanique qui se fonde sur les probabilités, nous avons un phénomène semblable aux ondes stationnaires, que l'on appelle les *états stationnaires*. Un état est dit stationnaire si la probabilité de présence de la particule est indépendante du temps. Ainsi la particule aura toujours la même chance d'être présente à un endroit de l'espace, pour importe le moment. Même si nous n'allons pas nous étendre sur les particularités du monde quantique et ses principes fondamentaux, il est connu que la mécanique quantique semble rentrer en contradiction avec la mécanique classique et l'intuition que nous pouvons avoir des choses qui nous entourent.

En mathématiques, le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique réside dans l'idée fondamentale que l'équation de Schrödinger « dérive » de l'équation des ondes de la mécanique classique :

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$$

Nous voyons que l'équation de Schrödinger et l'équation des ondes sont très similaires et qu'elles font intervenir les mêmes objets mathématiques, notamment le plus important, qui est le laplacien Δ . La résolution des deux équations fait souvent intervenir la même procédure : la recherche des fréquences propres du laplacien. Ainsi, grâce à cet objet mathématique, nous pouvons faire le lien entre ce qui se passe au niveau classique avec les plaques de Chladni et ce qui se passe au niveau quantique avec l'opérateur de Schrödinger. En effet, nous avons observé que dans le cas particulier des plaques de Chladni, plus les fréquences propres augmentent, plus les ondes stationnaires s'équidistribuent, se répartissant uniformément dans tout l'espace. Ainsi, nous pouvons nous demander s'il pourrait être possible de passer la même chose au niveau quantique, c'est-à-dire que si la fréquence propre d'un système quantique tend vers l'infini, alors la probabilité de présence de la particule s'uniformise dans l'espace, elle devient une probabilité uniforme. L'objet du théorème d'ergodicité quantique est de rendre cette observation mathématiquement rigoureuse.

Théorème d'ergodicité quantique

Billards et chaos déterministe en mécanique classique

La portée du théorème que nous allons présenter est très large. Alors, pour en faciliter la présentation, nous allons restreindre son étude au cas des billards. Le choix du billard est notamment dû au fait qu'il permet une bonne visualisation du théorème.

Un billard mathématique est un modèle dans lequel une seule boule évolue. De plus, celle-ci est lancée sans effet et se déplace sans frottement. Dans ce modèle, la boule se déplace en ligne droite, rebondit sur les parois de la table avec un angle réfléchi (de sortie) égal à l'angle incident (d'arrivée) et ne s'arrête jamais.

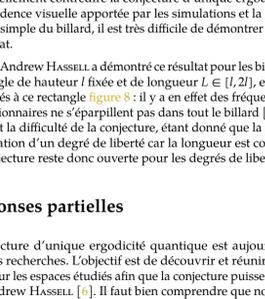


FIGURE 4 – Schéma de la réflexion aux bords

Les formes que peut prendre un billard sont multiples (figure 5) mais l'on préfère ici que le billard ne possède pas de coin pour des raisons de régularité de la trajectoire.

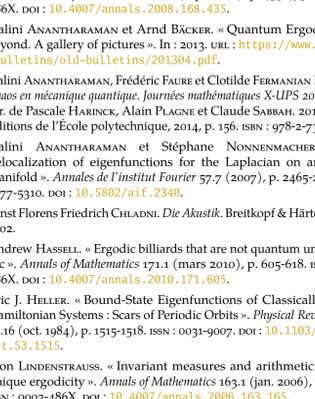


FIGURE 5 – Trois différents billards et les déplacements de la boule en son sein, avec des conditions initiales différentes (position de la boule et angles de l'impulsion)

Parmi les billards, il en existe des *intégrables*, c'est-à-dire ceux dont nous pouvons décrire simplement les trajectoires de la boule même après un certain temps. Parmi les billards *non-intégrables*, il existe des billards dits *chaotiques*. Par exemple, sur la figure 5, les deux premières lignes de billards représentent des billards intégrables, alors que le dernier billard est non-intégrable. Dans ceux-là, l'évolution de la boule est très difficile à prédire : si nous décalons très légèrement la boule de son point de départ alors la nouvelle trajectoire n'aura, à partir d'un certain moment, plus aucun rapport avec l'évolution précédente observée. On parle alors de *sensibilité aux conditions initiales*. Dans ce chaos apparent il peut subsister une certaine homogénéité que l'on nomme *ergodicité*. On peut la définir comme étant le fait que la particule aura passé en moyenne dans chaque région de la table de billard un temps proportionnel à l'aire de cette région. Par exemple, on peut raisonnablement penser que les deux premiers billards de la figure 5 sont non ergodiques (on voit des régions que la boule ne visite jamais) alors que le troisième semble l'être.

Présentation du théorème

Imaginez un billard « chaotique » sur lequel se meut une particule quantique. On étudie donc la probabilité de présence de cette particule au sein d'un billard restreint dans les conditions de réflexion citées plus haut. Nous savons d'ores et déjà que prévoir le mouvement de celle-ci est difficile voire impossible. Peut-on néanmoins avoir une vue d'ensemble sur ce qui se passe ? Le théorème d'ergodicité quantique nous donne une première réponse. Pour la plupart des fréquences, si la particule est dans un état stationnaire associé à cette fréquence, alors plus le temps s'écoulera, plus la particule visitera l'ensemble des régions du billard. Ainsi nous verrons apparaître une trajectoire qui s'uniformisera sur tout l'espace. Nous allons présenter une version technique et mathématique du théorème que nous expliquerons en détail par la suite. Il n'est pas forcément nécessaire de s'attarder sur l'énoncé du théorème en question pour comprendre le reste de l'article.

Théorème (Ergodicité quantique sur un billard [1])

Soit B un billard ergodique, ϕ_n les états stationnaires d'une particule quantique de B et λ_n les fréquences propres associées. Soit $N(F)$ le nombre de fréquences propres inférieures à une certaine fréquence F et $\in \mathbb{C}^s(B)$ nous ayons une fonction observable qui associe à tout point de du billard une valeur de présence. Alors :

$$\lim_{F \rightarrow \infty} \frac{1}{N(F)} \sum_{n, n' \leq F} |(\phi_n, a \phi_{n'})| = \int_B a(x) dVol(x)^2 = 0$$

Le théorème tel quel peut paraître dénué et obscur de par la diversité des concepts mis en jeu dans celui-ci. Néanmoins nous pouvons le comprendre simplement. Il énonce que pour la plupart des fréquences fondamentales, les états stationnaires associés ϕ_n s'équidistribuent, c'est-à-dire que la probabilité de présence de la particule dans une région du domaine est proportionnelle à l'aire de cette région. De façon similaire, dans le cas des plaques de Chladni, le théorème nous dit que pour la grande majorité des fréquences propres, les motifs que forme le sable vont s'étendre de façon à ce que le sable occupe toute la surface de la plaque. Plus précisément, la quantité de sable dans une région de la plaque est proportionnelle à l'aire de la région.

Nous allons maintenant expliciter les divers termes de l'énoncé. On suppose que le billard est ergodique (ses trajectoires s'équidistribuent). Alors les états stationnaires d'une particule quantique ont tendance à être délocalisés : ils ne se concentrent pas dans une région particulière mais vont s'éparpiller dans tout le billard. La probabilité de présence de ces états est donc proportionnelle à la probabilité uniforme. Plus précisément, $(\phi_n, \phi_{n'})$ définit, pour faire simple, la probabilité que l'état stationnaire se trouve à un certain endroit de l'espace. Dire que les états stationnaires s'éparpillent dans l'espace, c'est tout simplement dire que la probabilité de présence est proportionnelle à l'aire de la région $\int_B a(x) dVol(x)$. Mais attention, le théorème fait aussi apparaître les termes $\frac{1}{N(F)}$ et \sum synonymes de moyenne arithmétique. Ainsi il serait faux de conclure que tous les termes ont la même valeur car une moyenne peut admettre des écarts plus ou moins grand parmi ses termes. Ce théorème stipule donc que, physiquement parlant, la probabilité de présence de la particule s'équidistribue dans le billard pour la plupart des états stationnaires. Si pour la plupart des états stationnaires il y a équidistribution sur tout l'espace, n'existerait-il pas quand même certaines fréquences propres (certes rares) pour lesquelles les états stationnaires dérogeraient à la règle ?

Exemples et cicatrices

FIGURE 6 – Représentation de la probabilité de présence des états stationnaires pour des fréquences propres consécutives dans un billard cardioloïde

La figure 6 illustre parfaitement le théorème d'ergodicité quantique : les probabilités de présence (en vert) remplissent de façon générale les billards. Même si certains admettent de légères localisations, la moyenne permet l'équidistribution comme le prédit le théorème d'ergodicité quantique puisque le billard de la cardioloïde est bien ergodique [10].

Revenons alors aux plaques de Chladni. Nous remarquons que le théorème semble se vérifier (figure 7). Les grains de sable représentant les particules à une certaine fréquence propre s'éparpillent de plus en plus sur toute la plaque au fur et à mesure que les fréquences propres augmentent.

FIGURE 7 – Figures de Chladni pour des fréquences propres de plus en plus élevées (résultat prédit par le schéma de la figure 2)

Néanmoins parmi cette série de plaques de Chladni à différentes fréquences, étant donné qu'il y a une infinité de fréquences propres associées à la plaque, n'existe-t-il pas une fréquence assez haute telle que la figure de Chladni soit très localisée ? En effet, facteur limitant de ce théorème, il laisse la place à des fréquences exceptionnelles pour lesquelles les états stationnaires se concentrent dans des régions spécifiques du billard sans remplir tout l'espace. Ces états stationnaires sont nommés « scars » (cicatrices) par Eric J. HELLER [7]. L'objectif est donc d'essayer de comprendre les conditions d'une distribution parfaite des états stationnaires sur tout l'espace du billard. C'est ce que décrit l'unique ergodicité quantique qui n'est encore qu'une conjecture.

Conjecture d'unique ergodicité quantique

Présentation

Suite au théorème d'ergodicité quantique, nous pouvons nous poser une question tout à fait naturelle. Si le théorème d'ergodicité quantique énonce que la plupart des états stationnaires se dispersent sur le billard, en est-il de même pour tous les états stationnaires ? La question (voir [3]) est alors de savoir si on a, pour toute fonction $a \in C^s(B)$,

$$\lim_{F \rightarrow \infty} (\phi_n, a \phi_n) = \int_B a(x) dVol(x)$$

c'est-à-dire si nous avons non plus une convergence en moyenne, mais que la divergence apparaît pour toutes les fréquences propres, ou s'il existe une sous-suite de fréquences exceptionnelles qui converge vers une autre limite. En effet, s'il existait certaines fréquences propres pour lesquelles la probabilité de présence ne tend pas vers une probabilité uniforme en s'éparpillant sur l'ensemble de l'espace, alors la conjecture serait réfutée. Rappelons que la preuve formelle de ce théorème est alors très difficile car elle nécessite une compréhension fine des propriétés du *propagateur* de Schrödinger, qui est un outil mathématique qui gouverne l'évolution de la fonction d'onde. Si la limite est simple comme exprimée ci-dessus, on parle alors d'*unique ergodicité quantique*.

C'est dans cette optique que Zeév RUDNICK et Peter SARNAK ont conjecturé en 1994 que cette limite a lieu quand B est une variété compacte de courbure négative [9]. (La courbure négative permet d'obtenir l'ergodicité). La conjecture [9] est très générale et sa preuve reste encore largement ouverte. Mais, pour certains espaces, la conjecture est vérifiée et a été démontrée. Par exemple, Elon LINDENSTRAUSS a démontré que c'est le cas pour les surfaces arithmétiques à courbure négative constante (notion qui apparaît naturellement en théorie des nombres) [8].

Contre-exemples

Nombreux sont les billards qui vérifient (ou du moins semblent vérifier visuellement) le théorème d'ergodicité quantique. Mais vérifient-ils la conjecture d'unique ergodicité quantique ?

FIGURE 8 – Représentation des probabilités de présence des états stationnaires pour 30 fréquences propres consécutives dans un billard

Sur la figure 8, on remarque que la plupart des états stationnaires semblent confirmer le théorème d'ergodicité quantique mais il subsiste de rares fréquences propres où ces états se concentrent à des endroits précis. Un tel billard semble visuellement contredire la conjecture d'unique ergodicité quantique. Malgré l'évidence visuelle apportée par les simulations et la géométrie particulièrement simple du billard, il est très difficile de démontrer rigoureusement un tel résultat.

En 2008, Andrew HASSELL a démontré ce résultat pour les billards constitués d'un rectangle de hauteur l fixée et de longueur $L \in [l, 2l]$, et de deux demi-cercles accolés à ce rectangle figure 8 : il y a en effet des fréquences propres où les états stationnaires ne s'éparpillent pas dans tout le billard [1]. Cela montre parfaitement la difficulté de la conjecture, étant donné que la preuve se fonde sur l'élimination d'un degré de liberté car la longueur est contrainte à $[l, 2l]$. Ainsi la conjecture reste donc ouverte pour les degrés de liberté supérieurs.

Des réponses partielles

La conjecture d'unique ergodicité quantique est aujourd'hui au cœur de plusieurs recherches. L'objectif est de découvrir et réunir les hypothèses suffisantes sur les espaces étudiés afin que la conjecture puisse être vérifiée à la manière d'Andrew HASSELL [1]. Il faut bien comprendre que nous avons centré notre étude sur les billards afin de rendre le sujet accessible mais le théorème d'ergodicité quantique et la conjecture ont un domaine d'application bien plus vaste et qui se formule dans des contextes géométriques variés.

L'étude de la conjecture a connu de grandes avancées, notamment grâce à Nalini ANANTHARAMAN qui a démontré une version affaiblie de la conjecture d'unique ergodicité quantique, qui est un résultat important et très prometteur dans la résolution possible de la conjecture [4]. Elle a notamment démontré dans le cas des variétés à courbure négative constante – et donc non plus sur les simples billards – que les états stationnaires du laplacien ne peuvent pas se concentrer sur l'union des trajectoires périodiques fermées, qui sont des trajectoires périodiques où l'objet revient à son point de départ après un laps de temps $[1, 4]$. Il faut comprendre ce résultat comme une version affaiblie de la conjecture d'unique ergodicité quantique transposée à un domaine géométrique particulier. Malgré cet important résultat, Nalini ANANTHARAMAN est tout de même sceptique quant à une généralisation forte de la conjecture, notamment à cause de l'existence de divers contre-exemples. Depuis septembre 2023, elle développe une nouvelle méthode d'intégration en géométrie spectrale afin d'obtenir de nouveaux résultats sur la conjecture mais également sur d'autres problèmes liés au chaos quantique.

Références

- [1] Nalini ANANTHARAMAN. « Entropy and the localization of eigenfunctions ». *Annals of Mathematics* 168.2 (sept. 2008), p. 435-475. ISSN : 0003-486X. DOI : 10.4007/annals.2008.168.435.
- [2] Nalini ANANTHARAMAN et Arnd BÄCKER. « Quantum Ergodicity and beyond. A gallery of pictures ». In : 2013. URL : <https://www.iamp.org/bulletins/old-bulletins/201304.pdf>.
- [3] Nalini ANANTHARAMAN, Frédéric FAURE et Clotilde FERMANIAN KAMMERER. *Chaos en mécanique quantique. Journées mathématiques X-LIPS 2014*. Sous la dir. de Pascale HARINCK, Alain PLAIGNE et Claude SABBAH. 2014. éd. Les Éditions de l'École polytechnique, 2014, p. 156. ISBN : 978-2-7302-1631-9.
- [4] Nalini ANANTHARAMAN et Stéphane NONNENMÄCHER. « An Half-decentralization of eigenfunctions for the Laplacian on an Anosov manifold ». *Annales de l'institut Fourier* 57.7 (2007), p. 2465-2523. ISSN : 1777-5310. DOI : 10.5802/aif.2340.
- [5] Ernst Florens Friedrich CHLADNI. *Die Akustik*. Breitkopf & Härtel, Leipzig, 1802.
- [6] Andrew HASSELL. « Ergodic billiards that are not quantum unique ergodic ». *Annals of Mathematics* 171.1 (mars 2010), p. 605-618. ISSN : 0003-486X. DOI : 10.4007/annals.2010.171.605.
- [7] Eric J. HELLER. « Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems : Scars of Periodic Orbits ». *Physical Review Letters* 53.16 (oct. 1984), p. 1515-1518. ISSN : 0031-9007. DOI : 10.1103/PhysRevLett.53.1515.
- [8] Elon LINDENSTRAUSS. « Invariant measures and arithmetic quantum unique ergodicity ». *Annals of Mathematics* 163.1 (jan. 2006), p. 165-219. ISSN : 0003-486X. DOI : 10.4007/annals.2006.163.165.
- [9] Zeév RUDNICK et Peter SARNAK. « The behaviour of eigenstates of arithmetic hyperbolic manifolds ». *Communications in Mathematical Physics* 161.1 (mars 1994), p. 195-213. ISSN : 1432-0916. DOI : 10.1007/bf02099418.
- [10] Maciej WYPOKOSKI. « Principles for the design of billiards with nonvanishing Lyapunov exponents ». *Communications in Mathematical Physics* 105.3 (sept. 1986), p. 391-414. ISSN : 1432-0916. DOI : 10.1007/bf01205934.

Remerciements

Nous souhaitons remercier chaleureusement les relecteurs Jérémy Le Berne, Marc Kakotomlala, Didier Roche, ainsi que Thibault Leteuvre pour leurs conseils et aide précieuse dans la correction et l'amélioration de cet article. Nous tenons aussi à exprimer notre gratitude envers Pierre-Antoine Guichéneuf qui nous a donné l'opportunité d'écrire cet article, guidé et aidé du début à la fin de ce projet.

Article édité par Pierre-Antoine Guichéneuf.

JASON GARNIER
Étudiant en master de mathématiques et applications – Sorbonne Université

TITOUAN MOUSSET
Étudiant en master de mathématiques et applications – Sorbonne Université

Crédits

Figure 1 : Stephen W. Morris – University of Toronto

Figure 2 : Extrait de [5]

Figure 3 : BUP physique chimie N° 921 (février 2010), « Agrégations et Capes 2009 les corrigés »

Figure 4 : Wikipedia – Réflexion (physique)

Figure 5 : Elise Gouard, « Les mathématiques du billard », MATH.en.JEANS (6-7 avril 2019)

Figure 6 : Illustration de Arnd Bäcker [2]

Figure 7 : Stephen W. Morris – University of Toronto

Figure 8 : Illustration de Arnd Bäcker [2]

1. On trouve de nombreuses vidéos de cet étrange phénomène sur le web, par exemple celle-ci <https://youtu.be/6kmlb40Z78>.

2. Voir par exemple cette vidéo <https://youtu.be/XF0FuaORL8>.

3. ERC Advanced Grant « Integrating Spectral and Geometric data on Moduli Space »