Raymond Jancel

Théorie ergodique et observables macroscopiques en mécanique quantique

Séminaire L. de Broglie. Théories physiques, tome 24 (1954-1955), exp. n° 12, p. 1-10
<http://www.numdam.org/item?id=SLDB_1954-1955__24__A11_0>

Faculté des Sciences de Paris
-:-:-:-
Séminaire de Théories Physiques
(Séminaire Louis de BROGLIE)
Année 1954/55
-:-:-:-

1er février 1955

Exposé n° 12

THÉORIE ERGODIQUE ET OBSERVABLES MACROSCOPIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE,

par Raymond JANCEL.

L'objet de cet exposé est de développer quelques considérations relatives à la théorie ergodique en mécanique quantique qui sont inspirées, en particulier, d'un travail de G. Ludwig (Zeits. für Phys. 135, 1953, p.483). Elles ont principalement pour but d'établir une correspondance entre l'aspect quantique et l'aspect classique de cette théorie. Nous allons donc commencer en rappelant comment se présente le problème en mécanique classique.

1.- MÉCANIQUE CLASSIQUE.

La théorie ergodique a pour but de justifier le remplacement de la moyenne temporelle par la moyenne en phase d'une grandeur mécanique $f(P)$ où P est un point de l'espace des phases.

La formulation rigoureuse de ce problème est due en premier à Birkhoff (1931). Il montre d'abord que la limite temporelle de $f(P)$:

(1) $$\lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(P)\, dt = \bar{f}^t$$

existe pour toute fonction $f(P)$ sommable et définie sur tous les points d'un ensemble V invariant de l'espace des phases. Cette convergence a lieu presque partout sur V, c'est-à-dire à un ensemble de mesure nulle près. L'existence de la limite temporelle étant établie par ce théorème, il reste à déterminer dans quelles conditions cette limite est égale à la moyenne en phase. On obtient cette égalité dans le cas où l'ensemble V est métriquement indécomposable, c'est-à-dire si on ne peut le décomposer en deux sous-ensembles invariants de mesure non nulle. On peut alors écrire :

(2) $$\bar{f}^t = \frac{1}{\mu(V)} \int f(P)\, dV$$

où $\mu(V)$ est la mesure de V.

Dans les applications physiques, l'ensemble V est une hypersurface d'énergie constante et, l'indécomposabilité métrique de cette surface ne pouvant pas en général être démontrée, elle constitue une hypothèse sur la structure du système.

Une deuxième forme de la théorie ergodique, développée en particulier par V. Neumann et Hopf, consiste à remplacer la convergence presque sûre par une convergence en moyenne quadratique. Si $g(P)$ est une densité de distribution, elle devient au cours du temps $U_t \cdot g$ où U_t est l'opérateur unitaire qui décrit l'évolution de g dans l'espace d'Hilbert. La moyenne d'une fonction $f(P)$ à l'instant t est alors le produit scalaire hermitien $(f, U_t g)$. Nous dirons que la densité $g(P)$ tend en moyenne quadratique vers une densité limite $\bar{g}(P)$ si :

$$\lim_{T-S \to \infty} \frac{1}{T - S} \int_S^T \left| (f, U_t g) - (f, \bar{g}) \right|^2 dt = 0 \tag{3}$$

Cette convergence signifie physiquement que la moyenne temporelle des fluctuations statistiques de la moyenne en phase de $f(P)$ autour de sa valeur limite $(f, \bar{g})$ tend vers 0, quand l'intervalle $T-S$ augmente indéfiniment.

Il est intéressant, pour énoncer les conditions nécessaires à cette convergence, de ne pas se restreindre à une seule hypersurface d'énergie constante, mais de considérer une couche d'énergie de largeur ΔE. Il faut que chaque hypersurface de cette couche soit métriquement indécomposable, mais cette condition nécessaire n'est pas suffisante : il faut une condition supplémentaire concernant les paires d'hypersurfaces. Pour énoncer cette condition, il convient d'introduire le produit direct de l'espace des phases avec lui-même : les coordonnées de l'espace produit sont constituées d'une paire de l'ensemble des coordonnées de l'espace des phases initial ; à une paire d'hypersurfaces de l'espace initial correspond donc une seule hypersurface de l'espace produit. La deuxième condition pour que le théorème de Hopf soit vrai est que presque chaque hypersurface de l'espace produit soit métriquement indécomposable.

Nous allons indiquer brièvement, en vue d'une comparaison avec la théorie quantique, le fondement mathématique de cette démonstration qui repose sur un théorème de l'analyse harmonique des fonctions :

Si $g(t)$ est de la forme $g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} \, dv(\omega)$ où $v(\omega)$ est une fonction de distribution, à variation bornée, comprenant une partie continue et une partie discontinue, on a :

$$\lim_{T-S\to\infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \Big| g(t) - \sum_{\omega_\nu} [v(\omega_\nu+0)-v(\omega_\nu)] e^{i\omega_\nu t} \Big|^2 dt = 0$$

où $\sum_{\omega_\nu}$ représente la partie discontinue de $v(\omega)$.

Pour les applications cette formule peut aussi s'écrire :

$$\lim_{T-S\to\infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \Big| (f,U_t g) - (f,\sum_{\omega_\nu} e^{i\omega_\nu t} [E_{\omega_{\nu+0}} - E_{\omega_\nu}] g) \Big|^2 dt = 0$$

qui se réduit, pour le cas où la seule discontinuité de $v(\omega)$ se trouve au point $\omega = 0$, à la formule (3).

La démonstration de (3) est alors facile dans ce cas. En effet si nous définissons $\bar{g}$ par la seule relation $\bar{g} = (E_{0+} - E_0)g$ et l'opérateur U'_t par $U_t - (E_{0+} - E_0)$, on a : $(f,U_t g) - (f,\bar{g}) = (f,U'_t g)$ qui peut se représenter par l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\, d(f,E'_\omega g)$. La représentation E'_ω est alors partout continue et, en posant : $(f,E'_\omega g) = F(\omega)$, on est ramené à démontrer que :

$$\text{(4)} \qquad \lim_{T-S\to\infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \Big| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\, d\,F(\omega) \Big|^2 dt = 0$$

où $F(\omega)$ est partout continue. En posant $x = \omega - \omega'$, on a :

$$\Big| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\, d\,F(\omega) \Big|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixt} \int_{-\infty}^{+\infty} dF(\omega)\, \overline{dF(\omega - x)}$$

Si on pose : $\quad G(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{F(\omega - x)}\, d\,F(\omega)$

$G(x)$ est continue et on a :

$$\Big| \frac{1}{T-S} \int_S^T \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixt}\, dG(x)\, dt \Big| \leqslant \int_{-\infty}^{+\infty} \Big| \frac{e^{ixT} - e^{ixS}}{ix(T-S)} \Big|\, d|G(x)|$$

$$\leqslant \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} d|G(x)| + \frac{2}{\varepsilon(T-S)} \int_{-\infty}^{+\infty} d|G(x)| =$$

$$= |G(\varepsilon)| - |G(-\varepsilon)| + \frac{2}{\varepsilon(T-S)} |(f,g)|^2$$

On choisit d'abord ε assez petit pour que le premier terme soit inférieur à δ puis $T-S$ assez grand pour que le deuxième terme devienne à son tour plus petit que δ , ce qui achève de démontrer (4). Nous voyons que le résultat repose essentiellement sur la continuité de $F(\omega)$, donc sur le fait que $U_t\, g$

n'a de discontinuité qu'au point $\omega = 0$; condition que nous allons retrouver en théorie quantique.

2.- MÉCANIQUE QUANTIQUE.

Nous supposons que l'on a à faire à un système dont l'hamiltonien est indépendant du temps et peut s'écrire $H = \sum_i E_i P_{\varphi_i}$ où les P_{φ_i} sont les opérateurs de projection correspondant aux états propres de l'énergie ; nous admettrons que le spectre de l'hamiltonien est discret et qu'il n'est pas dégénéré. Nous supposons de plus que l'état initial du système est représenté par une matrice statistique W qui peut décrire soit un cas pur, soit un mélange de cas purs (elle prendrait alors la forme $W = \sum_\nu w_\nu P_{\psi_\nu}$).

Nous allons établir les conditions sous lesquelles on peut obtenir un théorème ergodique en moyenne quadratique. Soit $M_t(A)$ la valeur moyenne dépendant du temps d'une observable A ; elle s'écrit dans la représentation de Heisenberg

$$M_t(A) = Tr(U_t\ A\ U_t^*\ W) = \sum_{i,j} e^{i/\hbar(E_i - E_j)t}\ (E_i|A|E_j)(E_j|W|E_i)$$

et, en posant $E_i - E_j = \hbar\omega$, on obtient du fait que le spectre de H n'est pas dégénéré :

$$M_t(A) = \sum_\omega e^{i\omega t} \sum_{E_i} (E_i|A|E_i - \hbar\omega)(E_i - \hbar\omega|W|E_i) \tag{5}$$

Le problème est de démontrer que $M_t(A)$ tend en moyenne quadratique vers une limite indépendante du temps. Les termes indépendants du temps dans $M_t(A)$ sont de la forme :

$$\sum_{E_i} (E_i|A|E_i)(E_i|W|E_i) = Tr(A\ \overline{W}) \tag{6}$$

Nous allons donc essayer de montrer que :

$$\lim_{T-S\to\infty} \int_S^T [M_t(A) - Tr(A\ \overline{W})]^2 dt = \lim \frac{1}{T-S} \int_S^T [\sum_\omega e^{i\omega t}\ g(\omega)]^2 dt \to 0 \tag{7}$$

où l'on a posé, d'après (5) :

$$g(\omega) = \begin{cases} 0 \quad \text{pour} \quad \omega = 0 \\ \sum_{E_i} (E_i|A|E_i - \hbar\omega)(E_i - \hbar\omega|W|E_i) \quad \text{pour} \quad \omega \neq 0 \end{cases} \tag{8}$$

Par définition on a $\overline{g(\omega)} = g(-\omega)$ de sorte qu'on peut écrire (7) sous la forme :

$$Z = \lim_{T-S\to\infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T [\sum_\omega e^{i\omega t}\ g(\omega)]^2 dt = \sum_\omega |g(\omega)|^2 \tag{9}$$

Z ne peut donc devenir très petit que si tous les modules de $g(\omega)$ sont petits. Il suffit qu'un seul $|g(\omega)|$ soit grand pour que $M_t(A)$ ne tende pas vers une limite. L'hypothèse nécessaire qui va nous permettre de démontrer que Z tend vers 0 porte sur l'hamiltonien du système : on suppose qu'il n'existe pas de fréquence de résonance ω, c'est-à-dire que $E_i - E_j \neq E_{i'} - E_{j'}$ pour tout couple ij, $i'j'$, sauf si $i = i'$, $j = j'$; en portant cette condition dans (8), il vient alors :

$$(8') \qquad g(\omega) = \begin{cases} 0 \quad \text{pour} \quad \omega = 0 \\ (E_i|A|E_j)(E_j|W|E_i) \quad \text{pour un seul} \quad E_i - E_j = \hbar\omega \end{cases}$$

Nous pouvons maintenant évaluer Z pour un état pur $W = P_\psi$. On a :

$$(E_j|W|E_i) = (E_j|\psi)(\psi|E_i) \quad \text{et, par suite :}$$

$$Z = \sum_{\omega} |g(\omega)|^2 \leqslant \sum_{E_i, E_j} |(E_i|A|E_j)(E_j|\psi)(\psi|E_i)|^2$$

On a le signe d'inégalité car on aurait dû laisser de côté les termes où $E_i = E_j$. La forme de Z nous suggère de le comparer avec la valeur moyenne de A^2 prise par rapport à $\overline{W}$, soit : $\overline{M}(A^2) = \mathrm{Tr}(A^2\,\overline{W})$. En posant :

$$(10) \qquad m = \max_{E_i, E_j} |(E_i|A|E_j)(E_j|\psi)|$$

On peut montrer par un calcul facile, en utilisant l'inégalité de Schwartz, que l'on a :

$$(11) \qquad Z \leqslant \delta\, \mathrm{Tr}(A^2\,\overline{W}_\psi)$$

avec :

$$\delta^2 = \frac{m^2}{\sum_{E_i, E_j} |(E_i|A|E_j)|^2 |(\psi|E_i)|^2}$$

Pour que δ soit très petit par rapport à 1, il faut que les éléments de matrice $(E_i|A|E_j)$ soient très nombreux ; on peut préciser cette condition en remarquant que, si E_0 et E_0' sont les valeurs de l'énergie correspondant à m, il s'ensuit :

$$(12) \qquad \delta^2 \leqslant \frac{|(E_0|A|E_0')|^2}{\sum_{E_i} |(E_i|A|E_0')|^2}$$

Si d'autre part N_ν est le nombre des éléments $|(E_i|A|E_0')|$ pour lesquels

$$\frac{1}{\nu-1} \left| (E_0|A|E_0') \right| > \left| (E_i|A|E_0') \right| \geqslant \frac{1}{\nu} \left| (E_0|A|E_0') \right|$$

il en résulte d'après (12) que :

(13) $$\delta \leqslant \left(\sum_\nu \frac{N_\nu}{\nu^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

On voit donc, d'après (13), que les nombres N_ν doivent être très grands de sorte que parmi les éléments de matrice $(E_i|A|E_j)$, il y en aura un grand nombre du même ordre de grandeur ; cette condition définit les observables macroscopiques.

La démonstration précédente s'étend sans difficultés au cas où l'état initial est représenté par un mélange ; on a alors :

$$W = \sum_\nu w_\nu P_{\psi_\nu} \qquad \text{et} \qquad \overline{W} = \sum_\nu w_\nu \overline{W_{\psi_\nu}}$$

La grandeur Z devient dans ce cas :

$$Z = \lim_{T-S \to \infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \left[\sum_\nu w_\nu (M_t(A)_{\psi_\nu} - \mathrm{Tr}(A\, \overline{W}_{\psi_\nu}))\right]^2 dt$$

et, en appliquant l'inégalité de Schwartz :

$$Z \leqslant \lim_{T-S \to \infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \sum_\nu w_\nu \left[M_t(A)_{\psi_\nu} - \mathrm{Tr}(A\, \overline{W}_{\psi_\nu})\right]^2 dt$$

(14) $$\leqslant \sum_\nu w_\nu\, \delta\, .\overline{M}(A^2)_{\psi_\nu} = \delta\, .\overline{M}(A^2)$$

on voit que l'on est ramené à l'équation (11).

Ainsi le théorème ergodique en moyenne se trouve démontré avec les trois conditions énoncées ci-dessus et que nous résumons :

1) non dégénérescence du spectre de H : cette condition est l'analogue quantique de l'hypothèse classique de l'indécomposabilité métrique de l'hypersurface d'énergie.

2) Absence de fréquence de résonance dans le spectre de H qui est l'analogue quantique de l'hypothèse nécessaire à la démonstration du théorème de Hopf. En effet, si cette condition était violée, $M_t(A)$ prendrait la forme d'une série de Fourier et le mouvement serait périodique.

3) La condition imposée à l'observable A qui revient à dire que, macroscopiquement, on peut considérer son spectre comme fortement dégénéré. Cette condition

va nous permettre de définir les observables macroscopiques.

Nous allons maintenant montrer qu'en introduisant une définition convenable des observables macroscopiques, on peut ramener le théorème ergodique de la mécanique quantique à une forme analogue à celle du théorème classique de Hopf et Von Neumann.

3.- OBSERVABLES MACROSCOPIQUES.

Nous poserons d'abord que toute observation macroscopique s'étend sur un intervalle de temps T . Pour les différences $E_i - E_j$ pour lesquelles on a $|E_i - E_j| > \frac{\hbar}{\tau}$, il n'est pas nécessaire de postuler l'absence de fréquences de résonance, car les éléments de matrice de A sont négligeables (on peut en effet remplacer les éléments de matrice de A par des moyennes prises avec une répartition de Gauss ayant τ pour écart-type). On n'aura donc à considérer que des $\omega < \frac{1}{\tau}$.

D'autre part, nous supposerons que la précision de la mesure de l'énergie est de ΔE qui comprend un grand nombre d'états microscopiques E_i . Considérons maintenant les éléments de matrice définis sur une couche ΔE : ils peuvent s'exprimer en fonction de : $E = \frac{E_i + E_j}{2}$ et $\omega = \frac{E_i - E_j}{\hbar}$; la condition que l'observable A est macroscopique permet d'écrire que les éléments de matrice de A peuvent s'exprimer comme une fonction $F(E, \omega)$ qui est suffisamment régulière pour qu'on puisse remplacer les sommes par des intégrales. D'après les hypothèses faites plus haut, à <u>une valeur de</u> ω <u>correspond un seul élément de matrice de</u> A <u>sauf pour</u> $\omega = 0$ (absence de fréquence de résonance).

D'autre part, comme nous avons vu qu'il doit y avoir un grand nombre d'éléments de matrice du même ordre de grandeur, on pourra donc définir des domaines $\Delta \omega$ pour lesquels $F(E, \omega)$ est constante.

On a donc des cellules $(\Delta E, \Delta \omega)$ dans lesquelles on peut définir une densité moyenne du nombre d'éléments de matrice compris dans cette cellule ; soit $f(E, \omega)$ cette densité. Si le système est ergodique, à chaque ω correspond un seul élément de matrice sauf pour $\omega = 0$ où l'on a un grand nombre d'éléments de matrice. La densité $\rho(E, \omega)$ présentera donc une discontinuité sur la diagonale principale et pourra donc s'écrire :

$$f(E,\omega) = \sigma(E)\,\delta\omega + \theta(E,\omega) \tag{15}$$

où $\sigma(E)$ et $\theta(E,\omega)$ sont continues ; on a aussi : $\rho(E,\omega) = \rho(E,-\omega)$.

On peut faire correspondre à $\rho(E,\omega)$ la fonction de distribution $P(E,\omega)$ définie par :

(16) $$P(E,\omega) = \int_{-\infty}^{E}\int_{-\infty}^{\omega}\rho(E',\omega')dE'\,d\omega'$$

Dans le cas ergodique $P(E,\omega)$ croit continuement avec E et ω jusqu'au point de discontinuité $\omega = 0$, où l'on a :

$$P(E,+0) - P(E,0) = \int_{-\infty}^{E}\sigma(E')dE'$$

Avec ces définitions, on peut écrire :

(17) $$\begin{aligned} Tr(W\ A) &= \sum_{E_i E_j} \overline{(E_i|W|E_j)}(E_j|A|E_i) \\ &= \sum_{\Delta E,\Delta\omega} F(E,\omega) \sum_{E_i,E_j}{}' \overline{(E_i|W|E_j)} \end{aligned}$$

où $\sum'$ s'étend sur tous les E_i,E_j tels que $2E < E_i+E_j \leqslant 2(E+\Delta E)$ et $\hbar\,\omega < E_i-E_j \leqslant \hbar(\omega+\Delta\omega)$.

On peut aussi définir sur l'intervalle $(\Delta E, \Delta\omega)$ une valeur moyenne de $\sum'$ soit :

$$\sum{}' = \overline{w(E,\omega)}\ \rho(E,\omega)\Delta E\ \Delta\ \omega$$

de sorte qu'en portant cette expression dans (17) et en remplaçant les sommes par des intégrales :

(18) $$Tr(W\ A) = \int \overline{w(E,\omega)}\ F(E,\omega)\ dP(E,\omega)$$

On peut donc caractériser toutes les observables macroscopiques ainsi définies par une fonction $F(E,\omega)$ qui s'annule pour des ω grands et qui, pour le point de discontinuité $\omega = 0$, peut avoir des valeurs très différentes de $F(E,\omega)$ pour ω voisin de 0 . L'espérance mathématique est alors donnée par la formule (18) que l'on peut interpréter comme le produit scalaire sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, (W,F) .

Il reste encore à traduire l'évolution dans le temps de l'observable A . Dans la représentation de Heisenberg, elle est donnée par un opérateur unitaire T_t avec $T_t\ A = U_t\ A\ U_t^*$. En vertu de l'unitarité de T , on peut développer la relation précédente sous la forme :

(19) $$T_t\ A = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\ d(F_\omega\ A)$$

où les F_ω sont définis par : $F_\omega A = \sum_{\substack{E_i, E_j \\ (E_i - E_j < \hbar\omega)}} P_{\varphi_i} A P_{\varphi_j}$

Au point $\omega = 0$, $F_\omega A$ effectue un saut : $(F_{+0} - F_0)A = \sum_{E_i} P_{\varphi_i} A P_{\varphi_i}$.

De même que l'on a dans l'espace d'Hilbert $\mathcal{H}$ de la mécanique quantique

$$(E_i | F_{\omega'} A | E_j) = \begin{cases} (E_i | A | E_j) & \text{pour} \quad \omega \leqslant \omega' \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

on peut définir, dans l'espace $\overline{\mathcal{H}}$, $F_{\omega'}$ par :

$$F_{\omega'} F(E,\omega) = \begin{cases} F(E,\omega) & \text{pour} \quad \omega \leqslant \omega' \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

et par suite d'une manière analogue à (19) on a :

$$(20) \qquad F_t(E,\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} \, d(F_\omega F(E,\omega))$$

F_ω se comporte donc dans $\overline{\mathcal{H}}$ comme un opérateur de projection qui aura, d'après l'hypothèse ergodique, une seule discontinuité au point $\omega = 0$.

En utilisant le résultat mathématique énoncé au début de l'exposé, on voit qu'on peut écrire :

$$\lim_{T-S \to \infty} \frac{1}{T-S} \int_S^T \left| (w, T_t F) - (w, (F_{+0} - F_0)F) \right|^2 dt = 0$$

qui est une expression du théorème ergodique de la mécanique quantique en fonction des observables macroscopiques $F(E,\omega)$; tout à fait analogue à l'expression classique du théorème de Hopf et Van Neumann.

Nous avons donc montré la similitude dans les deux théories des raisonnements conduisant à l'établissement d'un théorème ergodique. Il semble cependant que la preuve de ce théorème soit plus simple en mécanique quantique du fait qu'il est facile de montrer l'existence de la moyenne temporelle de la valeur moyenne d'une observable. De plus, les conditions permettant l'ergodicité (non dégénérescence et absence de fréquence de résonance dans le spectre de l'énergie) ont une expression plus physique que leur analogue classique.

Remarquons toutefois que certaines réserves s'imposent tant au point de vue physique qu'au point de vue mathématique. La première réserve porte sur la convergence en moyenne quadratique : celle-ci n'entraîne pas en effet nécessairement une convergence bien définie relative à une suite de résultats de mesure. La deuxième porte sur la distinction à faire dans (10) entre la plus petite borne supérieure et le maximum réellement atteint et sur la nécessité de postuler l'existence de très nombreux éléments de matrice. L'ensemble de ces difficultés pourraient trouver une solution en étendant à la mécanique quantique la méthode des fonctions sommatoires élaborée par Khinchine en théorie classique : cet aspect du problème mérite une étude indépendante sur laquelle nous reviendrons par la suite.