

Condensation de Bose-Einstein

Arnaud Triay

Stage effectué à l'Institut Henri Poincaré en Juin-Juillet 2013
sous la direction de Mathieu LEWIN (CNRS & Université de Cergy-Pontoise)

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Condensation de Bose-Einstein	2
1.2	Énergie d'une particule quantique	2
1.3	Énergie d'un système à N particules	2
1.4	Condensation	3
2	État fondamental des opérateurs de Schrödinger	3
3	Modèle de Hartree	8
3.1	Étude préliminaire	8
3.2	Théorème : existence et unicité de l'état fondamental	9
4	Condensation de Bose-Einstein	11
4.1	Cas de $\hat{w} \geq 0$	11
4.1.1	Convergence de l'énergie	11
4.1.2	Condensation de Bose-Einstein : convergence en loi	13
4.2	Cas général	14
4.2.1	Cas de la dimension finie	16
4.2.2	Cas de la dimension quelconque	18
	Références	20

1 Introduction

1.1 Condensation de Bose-Einstein

La condensation de Bose-Einstein est un phénomène quantique se manifestant à très basse température pour un gaz de bosons très dilué. Initialement prédit par Satyendranath Bose pour des photons [1], il a été généralisé au cas des atomes par Albert Einstein en 1925. Dans cet état de la matière, toutes les particules du système occupent le même état quantique de plus basse énergie. La première réalisation d'un condensât date de 1995 par Eric Cornell et Carl Wieman, ce qui leur valut le prix Nobel de physique en 2001. Pour cela des atomes de rubidium ont été piégés et refroidis par technique "d'évaporation". Il existe plusieurs manières de piéger des particules : mise en rotation, puits de potentiel, etc. Dans ce qui suit, on considèrera que les particules sont piégées par un potentiel confinant $V(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$ avec $V(x) \rightarrow \infty$ quand $x \rightarrow \infty$.

1.2 Énergie d'une particule quantique

Rappelons tout d'abord qu'en mécanique quantique, les objets ne sont pas décrits comme des particules ponctuelles comme c'est le cas en mécanique classique, mais par une probabilité de présence, de densité notée $|u(x)|^2$, $x \in \mathbb{R}^3$ où u est appelée fonction d'onde de la particule. On prouve, d'après des postulats physiques, que la densité de probabilité d'impulsion $p \in \mathbb{R}^3$ (grandeur physique donnant accès à l'énergie cinétique d'un système) est $|\hat{u}|^2$ où \hat{u} est la transformée de Fourier de u .

L'énergie d'une particule classique soumise à un potentiel V est

$$\mathcal{E}_{cl}(x, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x).$$

Le premier terme représentant l'énergie cinétique et le second l'énergie potentielle. Par analogie, l'énergie moyenne, c'est-à-dire l'espérance de l'énergie mesurée d'une particule quantique est la fonctionnelle suivante, définie sur un sous-ensemble de la sphère de $L^2(\mathbb{R}^3)$ par

$$\mathcal{E}_q(u) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|p|^2}{2m} |\hat{u}(p)|^2 dp + \int_{\mathbb{R}^3} V(x) |u(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{|\nabla u(x)|^2}{2m} + V(x) |u(x)|^2 \right) dx. \quad (1)$$

1.3 Énergie d'un système à N particules

Soit un système de N particules quantiques, introduisons sa fonction d'onde $\Psi(x_1, \dots, x_N)$, $x_i \in \mathbb{R}^3$, qui représente l'état quantique du système : $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$ est la densité de probabilité de trouver les particules n° i en x_i . De même, on introduit $t(p_1, \dots, p_N) = |\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$ qui est la densité de probabilité de trouver les particules n° i avec une impulsion p_i . Les particules étant indiscernables $|\Psi|^2$ et $|\hat{\Psi}|^2$ doivent être symétriques, ce qui impose à ψ d'être symétrique ou bien anti-symétrique.

Définition 1. *Si un système de particules identiques possède une fonction d'onde Ψ qui est symétrique, ces particules sont appelées **bosons**.*

On considère un système de N bosons soumis à un potentiel V , confinant, c'est-à-dire $V(x) \rightarrow \infty$ quand $|x| \rightarrow \infty$. Les interactions entre couples de particules sont représentées par un potentiel w que l'on suppose radial, c'est-à-dire " $w(x) = w(|x|)$ ". On suppose que l'interaction entre particules tend vers 0 quand $N \rightarrow \infty$ et est un $\Theta(\frac{1}{N})$, c'est l'approximation de champ moyen. L'énergie du système s'écrit donc

$$\mathcal{E}(\Psi) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\nabla_{x_i} \Psi|^2 + \sum_{i=1}^N V(x_i) |\Psi|^2 + \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(x_i - x_j) |\Psi|^2 dx. \quad (2)$$

On supposera que V est une fonction continue et quitte à ajouter une constante à V on supposera que $V \geq 1$.

1.4 Condensation

L'état fondamental d'un système est l'état de plus basse énergie, le système tend très rapidement vers cet état, il est l'objet de notre étude. Ainsi, si $\mathcal{E}(\Psi)$ est l'énergie moyenne du système représenté par la fonction d'onde Ψ , il est question de chercher la fonction d'onde Ψ (si elle existe) qui minimise \mathcal{E} sur la boule unité de L^2 . Formellement la condensation de Bose-Einstein se traduirait par la convergence de Ψ (en un sens à préciser) vers une superposition d'un même état, par exemple : $u_0(x)^{\otimes N} = u_0(x_1)\dots u_0(x_N)$. La convergence de Ψ vers $u^{\otimes N}$ n'a pas lieu dans L^2 mais on montrera dans un premier temps qu'elle a lieu au sens des probabilités marginales.

Le but de ce mémoire est de formaliser le phénomène de condensation de Bose-Einstein et de le prouver dans le cadre de la limite de champ moyen. Il suit notamment le travail de Mathieu Lewin, Phan Thành Nam et Nicolas Rougerie [5]. Dans la **section 2**, nous montrons l'existence et l'unicité d'un état fondamental pour un système d'une particule plongée dans un potentiel confinant. L'opérateur de Schrödinger associé admet une plus petite valeur propre et l'espace propre associé est de dimension 1. De plus, toute fonction d'onde minimisant l'énergie admet une régularité qui dépend de celle de la fonction V . Dans la **section 3**, nous nous intéressons au modèle de Hartree qui décrit l'énergie d'une particule plongée dans un potentiel comprenant dorénavant un terme d'interaction avec une autre particule de même type, en plus du potentiel confinant. L'étude de ce modèle est un préliminaire à la démonstration du résultat central. Nous prouvons l'existence et l'unicité d'un état fondamental pour l'énergie de Hartree. Enfin dans la **section 4**, nous donnons différentes interprétations mathématiques du phénomène de condensation et nous nous appliquons à les montrer. On prouve dans un premier temps un résultat de convergence des lois marginales et dans un second temps la convergence d'opérateurs dits "densité" qui caractérisent la fonction d'onde du système. Pour ce dernier résultat, une première preuve s'appuie sur le lemme de Schur et traite le cas d'un espace de dimension finie, tandis qu'une seconde preuve traite le cas de la dimension quelconque et utilise un résultat d'analyse convexe : le théorème de Choquet [3].

Définition 2. *La loi de k particules est la loi de probabilité marginale :*

$$\rho^k(x_1, \dots, x_k) = \int |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_{k+1} \dots dx_N$$

On appelle alors **condensation de Bose-Einstein** les propriétés suivantes :

$$\sqrt{\rho_N} \rightarrow u_0 \text{ dans } H^1, \text{ pour un certain } u_0$$

ou

$$\forall k, \rho_N^k \rightarrow |u_0^{\otimes k}|^2 \text{ dans } L^1$$

ou

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})} = 1, \Psi \text{ symétrique}\}}{\inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1\}} = 1.$$

Remarque 3. *Cette dernière propriété est à interpréter de la manière suivante : l'énergie fondamentale du système s'approche par l'énergie fondamentale d'un système dont on a supposé les particules décorréelées.*

2 État fondamental des opérateurs de Schrödinger

Dans cette section, on prouve l'existence et l'unicité de l'état fondamental d'une particule soumise à un potentiel confinant. Ce résultat sera réutilisé dans les sections ultérieures où l'on posera une condition sur le potentiel d'interaction à deux corps pour se ramener au cas d'un potentiel confinant.

Rappelons l'expression de l'énergie d'une particule dans l'état u , soumise à un potentiel V , que l'on a supposé continu et confinant ($V(x) \rightarrow \infty$ quand $|x| \rightarrow \infty$) :

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\nabla u(x)|^2}{2m} + V(x)|u(x)|^2 dx,$$

Dans la suite, pour simplifier les calculs, et sans perte de généralité, on prendra $2m = 1$. L'état fondamental d'une particule est la fonction u_0 qui minimise \mathcal{E} .

Théorème 4. *Si $V \in C^0$ et vérifie $V(x) \rightarrow \infty$ quand $|x| \rightarrow \infty$ alors le problème de minimisation*

$$\mathcal{E}_0 = \inf_{u \in H^1, \|u\|_{L^2} = 1} \left\{ \mathcal{E}(u) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 dx \right\} = \inf_{u \in H^1, \|u\|_{L^2} = 1} \left\langle u, (-\Delta + V)u \right\rangle_{H^1, H^{-1}}$$

est atteint en un unique $u_0 \in H^1$ (modulo \mathbb{U}). De plus $u_0 \in C^1$, $u_0 > 0$ et résout

$$(-\Delta + V)u_0 = \mathcal{E}_0 u_0,$$

au sens des distributions (ou dans H^{-1}). Par ailleurs, si $v \geq 0$, $\|v\|_{L^2} = 1$ et vérifie $(-\Delta + V)v = \lambda v$, alors $v = u_0$.

Remarque 5. *Le caractère C^0 de V ne sert qu'à montrer la régularité de u_0 , prendre V dans L^2_{loc} suffit, en fait, à montrer l'existence et l'unicité de l'état fondamental.*

Démonstration. La démonstration s'effectue en trois étapes : existence, régularité et unicité. L'existence d'un état fondamentale est un résultat de compacité qui tient à ce que le potentiel est confinant et empêche la perte de masse à l'infini. La régularité est une conséquence du théorème d'injections de Sobolev. On prouve l'unicité par deux méthodes dont les résultats seront réutilisés ultérieurement.

Étape 1 : existence d'un minimiseur

Considérons $\mathcal{V} = \{u \in H^1, \mathcal{E}(u) < \infty\}$ muni du produit scalaire induit par la forme quadratique \mathcal{E} . $(u, v)_{\mathcal{V}} = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\nabla u} \cdot \nabla v + V \overline{u} v dx$. On rappelle que l'on a supposé $V \geq 1$ et que cela implique $\mathcal{E}(u) = \|u\|_{\mathcal{V}}^2 \geq \|u\|_{H^1}^2$.

Lemme 6. *$(\mathcal{V}, \|\cdot\|_{\mathcal{V}})$ est un espace de Hilbert.*

Démonstration. Soit $(u_n) \in \mathcal{V}^{\mathbb{N}}$ une suite de Cauchy pour $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$, alors elle est aussi de Cauchy pour $\|\cdot\|_{H^1}$. Comme H^1 est complet, on peut considérer u_0 , sa limite dans H^1 . Il reste à montrer que $u_0 \in \mathcal{V}$ et $u_n \rightarrow u_0$ dans \mathcal{V} . La partie gradient converge grâce à la convergence dans H^1 . Il suffit de montrer que $\int V|u_n - u_0|^2 \rightarrow 0$. Soit alors $\epsilon > 0$ et n_0 tel que $\forall p, q \geq n_0 : \int V|u_p - u_q|^2 < \epsilon$. La convergence ayant lieu aussi dans L^2 , il existe une extractrice telle que $u_{\varphi(p)} \rightarrow u_0$ presque partout. Alors $\int V|u_0 - u_q|^2 = \int \liminf_{p \rightarrow \infty} V|u_{\varphi(p)} - u_q|^2 \leq \liminf_{p \rightarrow \infty} \int V|u_{\varphi(p)} - u_q|^2 \leq \epsilon$. Ce qui implique $\int V|u_0|^2 < \infty$ et $u_n \rightarrow u_0$ dans \mathcal{V} . \square

Soit alors $u_n \in H^1$, $\|u_n\|_{L^2} = 1$, une suite minimisante, c'est-à-dire telle que $\mathcal{E}(u_n) \rightarrow \mathcal{E}_0$. Alors (u_n) est bornée dans \mathcal{V} et dans H^1 . Les deux espaces étant des Banach, leur boule unité est compacte pour la topologie faible. En effet :

Lemme 7. *Soit E un Banach. Alors E est réflexif si et seulement si $B_E(0, 1)$ est compacte pour la topologie faible.*

Quitte à extraire on peut supposer que $u_n \rightharpoonup u_0$ faiblement dans \mathcal{V} et que $u_n \rightharpoonup \tilde{u}_0$ faiblement dans H^1 . Or on la le

Lemme 8. *Théorème de Rellich : L'injection canonique de $H^1(\Omega)$ dans $L^2(\Omega)$ est compacte pour Ω est un ouvert à bord C^1 .*

Alors on a $u_0 = \tilde{u}_0$. En effet, prenons $\Omega = B(0, N)$, la suite (u_n) est bornée dans $H^1(\Omega)$ car convergente faiblement, on peut donc en extraire une sous-suite convergente dans $L^2(\Omega)$. Appelons \tilde{u}_0 sa limite. Pour $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega) : (\varphi, u_n)_{H^1} = \int \nabla \bar{\varphi} \nabla u_n + \varphi u_n = \int (-\Delta \bar{\varphi} + \varphi) u_n \rightarrow \int (-\Delta \bar{\varphi} + \varphi) \tilde{u}_0$ (car $u_n \rightarrow \tilde{u}_0$ dans L^2). Mais on a aussi, par hypothèse : $(\varphi, u_n)_{H^1} \rightarrow (\varphi, \tilde{u}_0)_{H^1}$. Donc $\tilde{u}_0 \in H^1$ et $\tilde{u}_0 = u_0$ par identification sur $\mathcal{D}(\Omega)$. Le même raisonnement permet d'identifier u_0 à \tilde{u}_0 .

Lemme 9. *Soit E un Banach et $(f_n) \in (E)^{\mathbb{N}}$. Si $f_n \rightharpoonup f$ alors $(\|f_n\|)$ est bornée et $\|f\| \leq \liminf \|f_n\|$.*

Démonstration. Par le théorème d'Hahn-Banach, il existe un élément de $x \in E^*$ tel que $x(f) = f$ et $\|x\| \leq 1$. Alors $x(f_n) \rightarrow x(f)$ et pour tout entier n , $\|x(f_n)\| \leq \|x\| \|f_n\|$, en passant à la limite inférieure on a : $\|x(f)\| = \|f\| \leq \liminf \|f_n\|$. \square

Nous pouvons maintenant terminer la preuve de l'existence. On a $\mathcal{E}(u_0) = \|\lim u_n\|_{\mathcal{V}}^2 \leq \liminf \|u_n\|_{\mathcal{V}}^2 = \mathcal{E}_0$. Il reste à montrer que $\|u_0\|_{L^2} = 1$. Rappelons les hypothèses, on a :

- $u_n \rightharpoonup u_0$ faiblement dans H^1
- $u_n \rightarrow u_0$ fortement dans $L^2(\Omega)$ (pour Ω ouvert à bord C^1 (et donc borné)).

Mais cela ne suffit pas à montrer $\|u_0\|_{L^2} = 1$. Par exemple : $u_n(x) = f(x - n)$ avec $f \in H^1$ satisfait les propriétés précédentes mais sa limite simple est nulle. Cependant, dans le modèle étudié, la particule est confinée à l'aide d'un potentiel coercif et elle ne peut pas "s'en aller à l'infini". Montrons que la masse se concentre dans un compact.

Lemme 10. *Pour tout $\epsilon > 0$, il existe un ouvert Ω à bord C^1 et $\exists n_0$ tel que pour tout entier $n \geq n_0$:*

$$\|\mathbb{1}_{\Omega^c} u_n\|_{L^2} \leq \epsilon,$$

Démonstration. En effet, sinon : on trouve $\epsilon > 0$ tel que pour tout Ω à bord C^1 il existe φ une extractrice qui vérifie : $\|\mathbb{1}_{\Omega^c} u_{\varphi(n)}\|_{L^2} > \epsilon$. Soit un tel ϵ , $V(x) \rightarrow \infty$ quand $|x| \rightarrow \infty$, on peut alors trouver r_0 tel que pour $|x| \geq r_0$ on ait $V(x) > \frac{\mathcal{E}_0 + 1}{\epsilon}$. Alors $\mathcal{E}(u_{\varphi(n)}) \geq \int_{|x| \geq r_0} V |u_{\varphi(n)}|^2 > \mathcal{E}_0 + 1$. Ce qui contredit le caractère minimisant de (u_n) . \square

Montrons maintenant que la convergence a lieu dans L^2 . Soit $\epsilon > 0$, $n_0 \geq 0$ et Ω un boule centrée en l'origine qui concentre la masse des termes de la suite à ϵ près à partir du rang n_0 et aussi celle de u_0 , c'est-à-dire $\|u_0 \cdot \mathbb{1}_{\Omega^c}\|_{L^2} < \epsilon$. Alors : $\|u_n - u_0\|_{L^2} \leq \|(u_n - u_0) \cdot \mathbb{1}_{\Omega^c}\|_{L^2} + \|(u_n - u_0) \cdot \mathbb{1}_{\Omega}\|_{L^2} \leq 2\epsilon + \|(u_n - u_0) \cdot \mathbb{1}_{\Omega}\|_{L^2}$. Le second terme tend vers 0 d'après le théorème de Rellich (Lemme 10). La convergence a donc lieu dans L^2 et $\|u_0\|_{L^2} = 1$, ce qui montre que le minimum est atteint. \square

Étape 2 : régularité

On montre maintenant que u_0 est C^1 et que $u_0 > 0$ (modulo \mathbb{U}).

Lemme 11. *Tout minimiseur u_0 pour \mathcal{E} vérifie $-\Delta u_0 + V u_0 = \mathcal{E}_0 u_0$ au sens de H^{-1} .*

Démonstration. Si u_0 est une solution au problème de minimisation, alors pour tout $h \in H^1$, l'application $\phi : t \mapsto \frac{\mathcal{E}(u_0 + t \cdot h)}{\|u_0 + t \cdot h\|^2}$ admet une dérivée nulle en 0. Ce qui donne :

$$\phi'(0) = 2\Re \left(\int \nabla \bar{u}_0 \nabla h + V \bar{u}_0 h - \mathcal{E}_0 \bar{u}_0 h \right) = 0$$

Le résultat s'obtient en effectuant les changements de variable $h \leftrightarrow \bar{h}$, et $h \leftrightarrow ih$. \square

Comme $V \in L_{loc}^{\infty}$ et $u_0 \in L^2$, on vient de montrer que $\Delta u \in L_{loc}^2$ et donc $u_0 \in H_{loc}^2$. Le théorème d'injections de Sobolev donne la régularité de u_0 .

Théorème 12. *Injections de Sobolev*
Pour Ω un ouvert borné à bord C^1

$$W^{k,p}(\Omega) \subset C^{r,\alpha}(\Omega) \text{ où } k, p, r \in \mathbb{N} \text{ et } \alpha \in [0; 1[\text{ si } r + \alpha = k - \frac{n}{p}$$

Ici, $r + \alpha = 2 - 3/2 = 1/2$, u_0 est alors 1/2-Hölderienne donc continue. Comme V est continu, il en est de même pour Δu_0 . Alors, si Ω est un domaine borné, $u_0 \in W^{2,p}(\Omega) \forall p$ et donc d'après le lemme, $u_0 \in C^{1,\alpha} \forall \alpha \in [0; 1[$. On remarque que la régularité de u_0 est limitée par celle de V . Si on prend $V \in C^\infty$ alors u_0 est C^∞ .

Montrons que $u_0 > 0$. Pour cela, utilisons le lemme suivant.

Théorème 13. *Soit $f \in C^0(\Omega)$ telle que $\Delta f - \mu f \geq 0$ pour un certain $\mu > 0$. Alors*

$$f(x) \leq \frac{1}{J(R)} [f]_{x,R}$$

où J (dont on admet l'existence et l'unicité) est la fonction radiale solution sur Ω de $\Delta J - \mu J = 0$ qui vérifie $J(0) = 1$ et $[f]_{x,R} = \frac{1}{|\mathbb{S}^{n-1}|} \int_{\mathbb{S}^{n-1}} f(x + R\omega) d\omega$ est la moyenne sur la sphère centrée en x et de rayon R . L'inégalité est satisfaite tant que la boule est incluse dans le domaine Ω .

La démonstration suit celle du théorème 9.9 de [6] qui énonce un résultat plus général.

Démonstration. On prouve le résultat pour une fonction à régularité C^∞ , puis on généralise par densité pour la norme uniforme. On admet ici l'existence de J , sa régularité C^∞ et sa stricte positivité. Si $f \in C^\infty$ alors l'hypothèse est valable ponctuellement. On a alors

$$\operatorname{div}(J\nabla f - f\nabla J) = \nabla J \cdot \nabla f + J\Delta f - \nabla f \cdot \nabla J - f\Delta J = J(\Delta f - \mu f) \geq 0.$$

En intégrant sur la sphère, et en utilisant la formule de Green-Ostrogradsky

$$\int_{\omega} \operatorname{div}(v) = \int_{\partial\Omega} v \cdot n,$$

on obtient

$$\int_{S(0,R)} J(R)\nabla f \cdot n - \int_{S(0,R)} f\nabla J \cdot n \geq 0.$$

Or $\frac{d}{dr} [f]_{x,R} = \frac{1}{|\mathbb{S}^{n-1}|} \int \omega \cdot \nabla f(x + R\omega) d\omega = \frac{1}{|\mathbb{S}^{n-1}|} \int \partial_r f$. D'où $\frac{d}{dr} \left(\frac{[f]_{x,R}}{J(R)} \right) \geq 0$, ce qui conclut la preuve. \square

Cas de $u_0 \geq 0$

Quitte à prendre $|u_0|$ au lieu de u_0 , on peut supposer que $u_0 \geq 0$. En effet, d'après le Lemme 15, on a $\|\nabla u\|_{L^2} \geq \|\nabla |u|\|_{L^2}$, il s'en suit que $\mathcal{E}(|u_0|) \leq \mathcal{E}_0(u_0)$. On remarque alors que sur un domaine Ω borné, V est bornée, disons par μ , on a donc

$$(\Delta - \mu)(-u_0) = -\Delta u_0 + \mu u_0 \geq -\Delta u_0 + V u_0 = \mathcal{E}_0 u_0 \geq 0.$$

Donc $-u_0$ satisfait les hypothèses du lemme, ce qui donne $[u_0]_{x,R} \leq u_0(x)$. La fonction u_0 étant positive, si elle s'annule en x , elle s'annule sur toute boule centrée en x incluse dans le domaine. On en déduit que u_0 ne prend que des valeurs strictement positives.

Cas de u_0 quelconque

La Proposition 15 entraîne l'existence d'un $|\omega| = 1$ tel que ωu_0 soit à valeurs réelles. En effet, sinon $\|\nabla |u_0|\|_{L^2} < \|\nabla u_0\|_{L^2}$ et $\mathcal{E}_H(|u_0|) < \mathcal{E}_H(u_0) = \mathcal{E}_0$. Alors $|u_0| > 0$ d'après le cas précédent, comme ωu_0 est C^0 elle ne peut changer de signe, d'où $\omega u_0 > 0$.

Unicité

1^{ère} méthode : Ground state resolution

Cette méthode consiste à montrer la propriété suivante :

Proposition 14. *Ground State Resolution*

Si $u \in \mathcal{V}$ alors

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\mathbb{R}^3} |u_0|^2 \left| \nabla \left(\frac{u}{u_0} \right) \right|^2 + \|u\|_{L^2}^2 \mathcal{E}_0$$

Alors, l'égalité n'ayant lieu que si $\nabla \left(\frac{u}{u_0} \right) = 0$ (on a montré que $u_0 > 0$), i.e. si u est proportionnel à u_0 , on a $u = \omega u_0$ où $|\omega| = 1$.

Démonstration. On montre d'abord la propriété pour $u = f u_0$ avec $f \in C_c^1$ (ce qui revient à prendre $u \in C_c^1$ puisque $u_0 > 0$), puis on généralisera par densité. On a la formule

$$\mathcal{E}(u_0 f) = \int |\nabla(u_0) f + u_0 \nabla(f)|^2 + \int V |f u_0|^2 = \int |f \nabla u_0|^2 + |u_0 \nabla f|^2 + 2u_0 \nabla u_0 \cdot \mathcal{R}(f \overline{\nabla f}) + \int V |u_0 f|^2.$$

En remarquant que $\nabla(|f|^2) = 2\mathcal{R}(f \overline{\nabla f})$, une intégration par parties permet alors de réécrire le troisième terme comme : $\int u_0 \nabla u_0 \nabla |f|^2 = - \int |f|^2 \operatorname{div}(u_0 \nabla u_0) = - \int |f|^2 (|\nabla u_0|^2 + u_0 \Delta u_0)$ et se simplifie en partie avec le premier. En utilisant l'expression de $-\Delta u_0$ du Lemme 11 on a :

$$\mathcal{E}(u_0 f) = \int u_0^2 |\nabla(f)|^2 + \mathcal{E}_0 \int |f|^2 u_0^2 = \int |u_0|^2 \left| \nabla \left(\frac{u}{u_0} \right) \right|^2 + \|u\|_{L^2}^2 \mathcal{E}_0.$$

Alors pour $u \in C_c^1$ développons $|u_0 \nabla \left(\frac{u}{u_0} \right)| = |\nabla u - \frac{u}{u_0} \nabla u_0| \geq \|\nabla u\| - \left| \frac{u}{u_0} \nabla u_0 \right|$. Donc si $u_n \in C_c^1 \rightarrow u \in \mathcal{V}$ dans \mathcal{V} et presque partout, on a $\mathcal{E}(u_n) \rightarrow \mathcal{E}(u)$ et par le lemme de Fatou, on trouve : $\left\| \frac{u}{u_0} \nabla u_0 \right\|_{L^2} = \left\| \liminf \frac{u_n}{u_0} \nabla u_0 \right\|_{L^2} \leq \liminf \left\| \frac{u_n}{u_0} \nabla u_0 \right\|_{L^2} \leq \mathcal{E}(u) + \|\nabla u\|_{L^2} < \infty$.

Soit alors $u \in \mathcal{V}$ et $u_n \rightarrow u$ dans \mathcal{V} et presque partout. Comme $u_0 \nabla \left(\frac{u - u_n}{u_0} \right) \in L^2$ et $\nabla(u - u_n) - \frac{u - u_n}{u_0} \nabla u_0 \in L^2$ et qu'ils sont égaux sur \mathcal{D}' (on rappelle que $u_0 \in C^1$), alors ils sont égaux sur L^2 . On a donc

$$\begin{aligned} \int |u_0 \nabla \left(\frac{u - u_n}{u_0} \right)|^2 &= \int \left| \nabla(u - u_n) - \frac{u - u_n}{u_0} \nabla u_0 \right|^2 = \int \liminf_p \left| \nabla(u_p - u_n) - \frac{u_p - u_n}{u_0} \nabla u_0 \right|^2 \\ &\leq \liminf_p \int \left| \nabla(u_p - u_n) - \frac{u_p - u_n}{u_0} \nabla u_0 \right|^2 = \liminf_p \mathcal{E}(u_p - u_n) - \mathcal{E}_0 \cdot \|u_p - u_n\|_{L^2}^2 \\ &\leq \mathcal{E}(u - u_n) - \mathcal{E}_0 \cdot \|u - u_n\|_{L^2}^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

□

On en déduit que $\int |u_0 \nabla \left(\frac{u_n}{u_0} \right)|^2 \rightarrow \int |u_0 \nabla \left(\frac{u}{u_0} \right)|^2$. Ce qui montre le résultat. Ainsi \mathcal{E} atteint son minimum une et une seule fois sur la sphère unité de L^2 modulo \mathbb{U} .

2^{ème} méthode : inégalité de convexité pour les gradients

Cette méthode utilise la stricte convexité de la fonctionnelle énergie et repose sur la propriété suivante dont la démonstration, disponible en annexe, suit celle du Théorème 7.8 de [6].

Proposition 15. *Inégalité de convexité pour les gradients*

Si $f, g \in H^1$ à valeurs réelles alors

$$\int |\nabla \sqrt{f^2 + g^2}|^2 \leq \int |\nabla f|^2 + \int |\nabla g|^2.$$

Si de plus $g > 0$ alors il y a égalité si et seulement si $\exists c \in \mathbb{R}$ tel que $f = cg$.

Maintenant, si f est à valeurs complexes, en considérant $\Re f$ et $\Im f$, l'inégalité donne : $\|\nabla|f|\|_{L^2} \leq \|\nabla f\|_{L^2}$. Nous pouvons alors utiliser la Proposition 15 pour prouver l'unicité dans le théorème. Si \mathcal{E} atteint son minimum sur la sphère unité de L^2 en u et v . Posons $w = \sqrt{\frac{|u|^2+|v|^2}{2}} \in H^1$ et $\|w\|_{L^2} = 1$. Alors

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w) &\leq \frac{1}{2}(\|\nabla|u|\|_{L^2}^2 + \|\nabla|v|\|_{L^2}^2) + \frac{1}{2}\left(\int V(|u|^2 + |v|^2)\right) \\ &\leq \frac{1}{2}(\|\nabla u\|_{L^2}^2 + \|\nabla v\|_{L^2}^2) + \frac{1}{2}\left(\int V(|u|^2 + |v|^2)\right) \\ &\leq \mathcal{E}_0. \end{aligned}$$

On a donc égalité dans les inégalités de convexité de gradients, en particulier il existe un complexe $|\omega| = 1$ tel que $v = \omega.u$, ce qui prouve l'unicité.

3 Modèle de Hartree

Comme expliqué dans l'introduction, on introduit un potentiel d'interaction à deux corps dont l'intensité décroît proportionnellement au nombre de particules. Cette dernière hypothèse est justifiée par ce qui suit. L'énergie du système est

$$\mathcal{E}(\Psi) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N |\nabla_{x_j} \Psi|^2 + \sum_{j=1}^N V(x_j) |\Psi|^2 + \epsilon \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(x_i - x_j) |\Psi|^2 dx_1 \dots dx_N.$$

On désire étudier le couplage entre le terme d'interaction et celui d'énergie de la particule seule lorsque $N \rightarrow \infty$. Pour que ces deux termes soient du même ordre de grandeur, on prend $\epsilon = \frac{1}{N-1}$.

On aimerait comparer Ψ (qui minimise \mathcal{E} sur son domaine qui, on rappelle, est un sous-ensemble de la sphère unité de L^2) à $u^{\otimes N}$, avec un certain u . C'est-à-dire montrer que le système évolue comme si les particules étaient indépendantes les unes des autres.

3.1 Étude préliminaire

Considérons l'énergie d'un système dont la fonction d'onde est $u^{\otimes N}$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(u^{\otimes(N)}) &= \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 dx \times \int_{\mathbb{R}^{3N-1}} |u^{\otimes(N-1)}|^2(x_2, \dots, x_N) dx_2 \dots dx_N \\ &+ \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dx dy \times \int_{\mathbb{R}^{3N-2}} |u^{\otimes(N-2)}|(x_3, \dots, x_N) dx_3 \dots dx_N. \end{aligned}$$

Les deux facteurs valent 1 si l'on prend $\|u\|_{L^2} = 1$.

$$\mathcal{E}(u^{\otimes(N)}) = N \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dx dy \right) = N \mathcal{E}_H(u)$$

Cela amène à étudier le problème suivant

$$\inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u) = \inf_{\|u\|_{L^2}=1} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 + V|u(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dx dy \right\}.$$

\mathcal{E}_H est l'énergie de Hartree d'une particule. Dans le cas d'une seule particule, on avait considéré \mathcal{V} l'espace des états d'énergie finie. C'est ce que l'on cherche ici aussi. En effet $\|u\|_{\mathcal{V}}^2 = \|\nabla u\|_{L^2}^2 + \int V|u|^2 < \infty$ n'assure

pas que $|\mathcal{E}_H| < \infty$ ni que $\inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u) > -\infty$. On se restreint alors à une classe de fonction plus petite. Cherchons p et r tels que $\mathcal{V} \cap L^p$ pour $w \in L^r$ convienne, c'est-à-dire que pour $u \in \mathcal{V} \cap L^p$ on ait $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$ et $\inf_{\mathcal{V} \cap L^p} \mathcal{E}_H > -\infty$.

Lemme 16. *Inégalité de convolution de Young [6, Th. 4.2]*

Soit $f \in L^p, g \in L^q, h \in L^r$. Si $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r} = 2$ alors

$$\left| \int f(x)(g \star h)(x) dx \right| \leq C_{p,q,r} \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q} \|h\|_{L^r}.$$

Raisonnons par analyse-synthèse. Ici $f = g = u^2 \in L^p$, d'où : $\frac{1}{r} = 2(1 - \frac{1}{p})$ et $|\int (u^2 \star w) u^2| \leq \|u\|_{L^{2p}}^4 \|w\|_{L^r}$. Ce qui assure $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$ On a alors la minoration suivante :

$$\mathcal{E}_H(u) \geq \int V(x)|u(x)|^2 dx + \int |\nabla u|^2 - \|w\|_{L^r} \|u\|_{L^{2p}}^4$$

or on a le

Théorème 17. *Sobolev*

Pour $1 \leq s < d$ on a

$$C \|u\|_{L^{s^*}} \leq \|\nabla u\|_{L^s} \text{ où } s^* = \frac{d \cdot s}{d - s}$$

Ici on prend $s = 2$ et donc $s^* = \frac{2d}{d-2}$ et on a la minoration :

$$\mathcal{E}_H(u) \geq \int V(x)|u(x)|^2 dx + C^2 \|u\|_{L^{s^*}}^2 - \|w\|_{L^r} \|u\|_{L^{2p}}^4$$

Lemme 18. *Inégalité d'interpolation*

Si $\frac{1}{\hat{p}} = \frac{\theta}{\hat{q}} + \frac{1-\theta}{\hat{r}}$ alors $\|f\|_{L^{\hat{p}}} \leq \|f\|_{L^{\hat{q}}}^\theta \|f\|_{L^{\hat{r}}}^{1-\theta}$, où $\theta \in [0; 1]$.

Démonstration. C'est une reformulation de l'inégalité d'Hölder. □

Appliquons le lemme avec $\hat{q} := 2$, $\hat{r} := s^*$ et $\hat{p} := 2p$. On cherche donc un p tel que $\exists \theta : \frac{1}{2p} = \frac{\theta}{2} + \frac{1-\theta}{s^*}$. Cherchons alors une condition sur p pour en déduire une sur r . On a pour $\|u\|_{L^2} = 1 : \|u\|_{L^{2p}} \leq 1^\theta \|u\|_{L^{s^*}}^{1-\theta}$ on veut donc : $4(1-\theta) < 2$. Ce qui se traduit par $r > \frac{d}{2}$ et qui garantie $\inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u) > -\infty$ sur $\mathcal{V} \cap L^p$ et $w \in L^r$ avec $\frac{1}{r} = 2(1 - \frac{1}{p})$.

$$\mathcal{E}_H(u) \geq \int V(x)|u(x)|^2 dx + C^2 \|u\|_{L^{s^*}}^2 + o(\|u\|_{L^{s^*}}^2)$$

Dans la suite on supposera $w \in L^r$ avec $r > \frac{d}{2}$, et on notera p le nombre qui vérifie $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$ et on aura $u \in L^p$ ($p > 6$).

3.2 Théorème : existence et unicité de l'état fondamental

Théorème 19. *Énergie de Hartree*

$\inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u)$ est atteint. De plus, si on suppose $\hat{w} > 0$ alors il est atteint de manière unique (à une phase près).

Étape 1 : existence

Soit $(u_n) \in (\mathcal{V} \cap L^p)^\mathbb{N}$ une suite minimisante pour \mathcal{E}_H . Rappelons que l'on a l'inégalité :

$$\mathcal{E}_H(u) \geq \int V(x)|u(x)|^2 dx + \int |\nabla u|^2 - \|w\|_{L^r} \|u\|_{L^{2p}}^4.$$

Or $\|u\|_{L^{2p}}^4 \leq \|u\|_{L^{s^*}}^{4(1-\theta)} \leq C' \|\nabla u\|_{L^2}^{4(1-\theta)}$ si $\|u\|_{L^{2p}} \geq 1$. On en déduit que (u_n) est bornée dans \mathcal{V} . On peut en extraire une sous-suite qui converge faiblement dans \mathcal{V} et dans H^1 , fortement dans L^2 et presque partout vers la même limite (cf 2.1).

On a $\|u\|_{\mathcal{V}} \leq \liminf \|u_n\|_{\mathcal{V}}$. On va prouver que le terme d'interaction à deux corps tend vers celui de la limite u_0 . Pour cela on montre que $u_n \rightarrow u_0$ dans L^{2p} et on a recours au

Lemme 20. $\forall a \leq b < c$: si $u_n \rightarrow u$ dans L^a et (u_n) est bornée dans L^c alors $u_n \rightarrow u$ dans L^b .

Démonstration. C'est une conséquence du Lemme 18. Sans perte de généralité on prend $u = 0$, alors il existe $0 < \theta \leq 1$ tel que $\frac{1}{b} = \frac{\theta}{a} + \frac{1-\theta}{c}$ et $\|u_n\|_{L^b} \leq \|u_n\|_{L^a}^\theta \cdot \|u_n\|_{L^c}^{1-\theta}$. Ce qui montre le résultat. \square

Comme $\|u_n\|_{p^*} \leq \|\nabla u_n\|_{L^2}$ et que $u_n \rightarrow u_0$ dans L^2 . Il reste à montrer que $2 \leq 2p \leq p^*$. Or $2r > d$ d'où :

$$p^* = \frac{2d}{d-2} > \frac{4r}{2r-2} > \frac{4r}{2r-1} = 2p \geq 2.$$

Alors d'après le lemme précédent : $u_n \rightarrow u_0$ dans L^{2p} . L'inégalité d'Young nous assure la continuité du terme d'interaction à deux corps sur l'espace $L^p \times L^p$. Or $\int |u_0^2 - u_n^2|^p \leq \sqrt{\int |u_0 - u_n|^{2p}} \cdot \sqrt{\int |u_0 + u_n|^{2p}} \leq \sqrt{\int |u_0 - u_n|^{2p}} \cdot (\sqrt{\int |u_0|^{2p}} + \sqrt{\int |u_n|^{2p}}) \rightarrow 0$. Ainsi $\int (w \star u_n^2) u_n^2 \rightarrow \int (w \star u_0^2) u_0^2$. Ce qui montre que $\mathcal{E}_H(u_0) \leq \inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u)$ et $u_n \rightarrow u_0$ dans L^2 assure que $\|u\|_{L^2} = 1$.

Étape 2 : convexité de la fonctionnelle énergie, unicité et régularité du minimiseur positif

Sous l'hypothèse $\hat{w} > 0$, on peut montrer que \mathcal{E}_H atteint n'admet qu'un minimiseur positif sur $S(0, 1)_{L^2}$. Tout d'abord, la Proposition 15 nous assure que si u minimise \mathcal{E}_H sur $S(0, 1)_{L^2}$ alors il existe un nombre complexe $|\omega| = 1$ tel que ωu soit à valeurs réelles. Sinon $\|\nabla|\omega u|\|_{L^2} < \|\nabla u\|_{L^2}$ et $\mathcal{E}_H(|u|) < \mathcal{E}_H(u) = \mathcal{E}_0$. On ne considérera à présent que des fonctions réelles. Enfin, la transformation de Fourier, qui est une isométrie de L^2 dans lui même, permet d'écrire :

$$\mathcal{E}_H(u) = \int |\nabla u|^2 + \int V|u|^2 + \int \hat{w}|\widehat{u^2}|^2. \quad (3)$$

Vu l'expression de \mathcal{E} : $\mathcal{E}(|u|) = \mathcal{E}(u)$. On supposera dorénavant $u \geq 0$ sans perte de généralité.

Unicité du minimiseur positif

Démonstration. Posons $\rho = u^2$ et montrons l'unicité de ρ . L'énergie associée à ρ est $\mathcal{F}(\rho) = \int |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + \int V\rho + \int \hat{w}|\hat{\rho}|^2$. Soit $\sigma = v^2 \geq 0$ un autre minimiseur de \mathcal{F} alors posons $w = \sqrt{t\rho + (1-t)\sigma}$. $\|w\|_{L^2} = 1$ et on a : $\mathcal{E}_H(w) = \int |\nabla \sqrt{tu^2 + (1-t)v^2}|^2 + \int V(tu^2 + (1-t)v^2) + \int \hat{w}|(tu^2 + (1-t)v^2)|^2$. Le premier terme est une expression convexe en ρ d'après la Proposition 15, le second est linéaire, donc convexe, en ρ , et le dernier est strictement convexe car on a supposé $\hat{w} > 0$. Alors si $u \neq v$ pour $0 < t < 1$: $\mathcal{E}_H(w) < t\mathcal{E}_H(u) + (1-t)\mathcal{E}_H(v) = \mathcal{E}_0$, ce qui est absurde. \square

Régularité du minimiseur positif

Le schéma de la preuve est le même que dans le cas à 1 particule, à ceci près que l'équation différentielle vérifiée par un minimiseur u n'est plus linéaire. Cependant, l'opérateur intervenant ne dépend que de $|u|$ qui (cf 3.2) est unique en tant que solution positive. Une condition sur w permet alors de se ramener au cas à 1 particule.

Lemme 21. *Si u minimise \mathcal{E} sur $S(0,1)_{L^2}$ alors il vérifie l'équation suivante au sens des distributions :*

$$(-\Delta + V + w \star |u|^2)u = \mathcal{E}_0 u,$$

où \mathcal{E}_0 est l'énergie fondamentale.

Démonstration. La preuve suit exactement celle du Lemme 11 et utilise le fait que $w(-x) = w(x)$. □

On voudrait une estimation de $-\Delta u$ pour appliquer le théorème d'injection de Sobolev. On voudrait au moins $(w \star u^2)u \in L^2$. Or, $w \in L^{p'}$, $p' > 3/2$ et $u \in L^2 \cap L^p$, $p > 6$ donc $u^2 \in L^q$ avec $1 < q < 3$ et l'inégalité d'Hölder montre que $w \star u^2 \in L^\infty$.

Donc $(w \star |u|^2)u \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Le théorème d'injection de Sobolev 12 donne $u \in C^{1,5}$.

Remarque 22. *L'unicité d'une solution positive aurait en fait suffi à prouver le phénomène de condensation puisque la loi marginale associée à la position ρ ne dépend que de $|u|$. Cependant, il est intéressant de connaître l'ensemble des solutions car une fonction d'onde u , à valeurs complexes, contient plus d'information que son module $|u|$.*

Étape 3 : Ground State Resolution, unicité du minimiseur modulo \mathbb{U}

On rejoint donc les hypothèses de régularité utilisés dans la proposition 14. D'après 3.2 $|u|$ est unique, on peut donc poser $\tilde{V} = V + w \star |u|^2$ qui est commun à tout les minimiseurs. De la continuité de u_0 , on en déduit que \tilde{V} est localement borné, et on peut appliquer le Lemme 13 qui prouve la stricte positivité de u_0 .

Proposition 23. *Si $u \in \mathcal{V}$ minimise \mathcal{E} sur $S(0,1)_{L^2}$ alors il vérifie*

$$\mathcal{E}(u) = \int |u_0|^2 \left| \nabla \left(\frac{u}{u_0} \right) \right|^2 + \mathcal{E}_0.$$

Démonstration. En effet, si u minimise \mathcal{E} sur $S(0,1)_{L^2}$, alors $|u|$ aussi et $|u| = |u_0|$ par 3.2, donc u il est soumis au même potentiel \tilde{V} que u_0 . Le reste de la preuve suit exactement celle de la proposition 14. □

Mais alors, $\mathcal{E}(u) = \mathcal{E}_0$ et donc $\nabla \left(\frac{u}{u_0} \right) = 0$. La régularité C de u et u_0 donne immédiatement la colinéarité.

Remarque 24. *On a le résultat plus général suivant : si $f, g \in H^1$ et $g > 0$ alors $\nabla \left(\frac{f}{g} \right) = 0 \implies \exists c \in \mathbb{R}, f = cg$. Voir Proposition 15.*

4 Condensation de Bose-Einstein

4.1 Cas de $\hat{w} \geq 0$

4.1.1 Convergence de l'énergie

On désire montrer la propriété suivante :

Proposition 25.

$$\frac{\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})} = 1, \Psi \text{ symétrique}\}}{\inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1\}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1$$

Ce qui s'interprète par le fait que l'énergie du système de particules se rapproche de l'énergie fondamentale d'un système de particules indépendantes.

Démonstration. On a clairement que $\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2=1}\} \leq \inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2=1}\}$. Pour l'inégalité inverse on minore un à un les termes de l'énergie associée à une fonction d'onde Ψ quelconque (2). On note $\rho(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$. On cherche à comparer $\mathcal{E}(\Psi)$ et $\mathcal{E}(\sqrt{\rho}^{\otimes N})$.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\Psi) &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N |\nabla_{x_i} \Psi|^2 + \sum_{i=1}^N V(x_i) |\Psi|^2 + \epsilon \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(x_i - x_j) |\Psi|^2 dx \\ \mathcal{E}(\sqrt{\rho}^{\otimes N}) &= N \mathcal{E}_H(\sqrt{\rho}) = N \int |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + N \int V \rho + N \int \hat{w} |\hat{\rho}|^2 \end{aligned}$$

Minoration du terme d'énergie cinétique

Pour $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ on a

$$\int \rho \nabla \varphi = \int |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 \nabla \varphi dx_1 \dots dx_N = - \int \varphi 2\Re(\bar{\Psi} \nabla \Psi).$$

D'où $\nabla \rho = 2 \int \Re(\bar{\Psi} \nabla_{x_1}(\Psi))$. D'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a presque partout :

$$|\nabla \rho| \leq 2 \sqrt{\int |\Psi|^2 dx_2 \dots dx_N} \sqrt{\int |\nabla_{x_1} \Psi|^2 dx_2 \dots dx_N} = 2\sqrt{\rho} \sqrt{\int |\nabla_{x_1} \Psi|^2 dx_2 \dots dx_N}.$$

Ainsi $|\nabla \sqrt{\rho}|^2 = |\frac{1}{2} \frac{\nabla \rho}{\sqrt{\rho}}|^2 \leq \int |\nabla_{x_1} \Psi|^2 dx_2 \dots dx_N$. Alors

$$\int \sum_{i=1}^N |\nabla_{x_i} \Psi|^2 = N \int |\nabla_{x_1} \Psi|^2 \geq N \int |\nabla \sqrt{\rho}|^2.$$

Minoration du terme d'énergie potentiel

$$\sum_{i=1}^N \int V(x_i) |\Psi|^2 = N \int V(x_1) |\Psi|^2(x_1, \dots, x_N) = N \int V \rho dx$$

On a en fait égalité.

Minoration du terme d'interaction à deux corps

Théorème 26. *Approximation par des fonctions C^∞ [6, Thm 2.16]*

Soit $j \in L^1(L^d)$ tel que $\int j = 1$, pour $\epsilon > 0$ on pose $j_\epsilon(x) = \epsilon^{-d} j(\frac{x}{\epsilon})$. Alors pour $f \in L^p$ où $1 \leq p < \infty$ on note : $f_\epsilon = j_\epsilon \star f$. On a les propriétés suivantes :

- $f_\epsilon \in L^p$ et $\|f_\epsilon\|_{L^p} \leq \|f\|_{L^p}$
- $f_\epsilon \rightarrow f$ dans L^p quand $\epsilon \rightarrow 0$
- si $j \in C^\infty$ alors $f_\epsilon \in C^\infty$.

Quitte à extraire, on supposera dorénavant que la convergence à lieu presque partout.

Pour $f \in L^p$ on a $\int (w \star f)f = \int \hat{w}|\hat{f}|^2 \geq 0$. Soit alors $j_{x_i}^\epsilon(x) = \epsilon^{-3}j(\frac{x-x_i}{\epsilon})$ où $j \in L^1(\mathbb{R}^3)$ et $\int j = 1$, prenons $f = \sum_{i=1}^N j_{x_i}^\epsilon - g$ où $g \in L^p$, alors (w étant radial) :

$$\begin{aligned} & \int dx dy w(x-y) \left(\sum_{i=1}^N j_{x_i}^\epsilon(x) - g(x) \right) \left(\sum_{i=1}^N j_{x_i}^\epsilon(y) - g(y) \right) = \\ & 2 \sum_{i < j} \int dx dy w(x-y) j_{x_i}^\epsilon(x) j_{x_j}^\epsilon(y) + \sum_{i=1}^N \int dx dy w(x-y) j_{x_i}^\epsilon(x) j_{x_i}^\epsilon(y) \\ & - 2 \sum_{i=1}^N \int dx dy w(x-y) g(y) j_{x_i}^\epsilon(x) + N^2 \int dx dy w(x-y) g(x) g(y) \geq 0. \end{aligned}$$

Par le Théorème 26, appliqué avec j^ϵ et $(j^\epsilon)^{\otimes 2}$, pour presque tout x_1, \dots, x_N , on a :

$$2 \sum_{i < j} w(x_i - x_j) + Nw(0) - 2 \sum_{i=1}^N \int dy w(x_i - y) g(y) + N^2 \int dx dy w(x-y) g(x) g(y) \geq 0.$$

Après multiplication par $|\Psi|^2(x_1, \dots, x_N)$ et intégration ($\int |\Psi|^2 = 1$) on a :

$$2 \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x_i - x_j) |\Psi|^2 \geq 2 \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^{3N}} \int_{\mathbb{R}^3} w(x_i - y) g(y) |\Psi|^2 - Nw(0) - N^2 \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} dx dy w(x-y) g(x) g(y).$$

Prenons $g = N\rho$, alors :

$$\sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x_i - x_j) |\Psi|^2 \geq \frac{N^2}{2} \int dx dy w(x-y) \rho(x) \rho(y) - \frac{N}{2} w(0).$$

Finalement, les trois estimations réunies donnent : $\mathcal{E}(\Psi) \geq N\mathcal{E}_H(\sqrt{\rho}) - \frac{N}{2(N-1)}w(0) \geq Ne_H - \frac{N}{2(N-1)}w(0)$, où e_H est l'énergie fondamentale du modèle de Hartree. Ce qui montre que

$$\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2=1}\} \underset{N \rightarrow \infty}{\sim} \inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2=1}\}.$$

□

4.1.2 Condensation de Bose-Einstein : convergence en loi

On montre de la même manière que pour le modèle de Hartree que $\inf_{\|\Psi\|_{L^2=1}} \mathcal{E}(\Psi)$ est atteint.

Proposition 27. *On note $\rho_N(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$ où Ψ est un état fondamental (il minimise l'énergie). Alors $\rho_N \rightarrow u_0$ dans \mathcal{V} où u_0 est l'unique minimiseur positif de \mathcal{E}_H*

Remarque 28. *La convergence dans \mathcal{V} entraîne la convergence dans H^1*

Démonstration. En effet, d'après l'étude de l'énergie d'un système à N particules (Proposition 25), $(\sqrt{\rho_N})$ est une suite minimisante de \mathcal{E}_H . Il s'en suit que $(\sqrt{\rho_N})$ est bornée dans \mathcal{V} , on peut donc en extraire une sous suite convergente faiblement dans \mathcal{V} (c'est un espace de Hilbert). Comme V est un potentiel confinant $(\sqrt{\rho_N})$ converge fortement dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ (cf Lemme 10). Notons $\sqrt{\rho}^*$ cette limite, elle est donc de norme 1, minimise \mathcal{E}_H et est positive. La proposition 19 nous assure l'unicité d'un tel état fondamental : $u_0 = \sqrt{\rho}^* = \lim \sqrt{\rho_N}$ (dans L^2).

Or, \mathcal{V} est un Hilbert, il suffit de remarquer que $\mathcal{E}_H(\sqrt{\rho_N}) = \|\sqrt{\rho_N}\|_{\mathcal{V}}^2 \rightarrow \mathcal{E}_0 = \|u_0\|_{\mathcal{V}}^2$ (cf Proposition 25) car la suite $(\sqrt{\rho_N})$ converge déjà faiblement. On en déduit la convergence forte dans \mathcal{V} . □

4.2 Cas général

Résultats sur les opérateurs densité

Le résultat qui vient d'être prouvé montre que la marginale de la loi de probabilité relative à la position d'une particule converge vers la fonction d'onde de l'état fondamental du modèle de Hartree avec hypothèse supplémentaire $\hat{w} > 0$. Mais, comme on l'a déjà souligné à la Remarque 22, une fonction d'onde contient plus d'information qu'une loi de probabilité. Il est donc légitime de vouloir généraliser ce résultat de convergence aux fonctions d'ondes. Dans ce but, on définit des "opérateurs densité", caractérisant la fonction d'onde du système. Ce sont des opérateurs à trace, et nous allons montrer que l'opérateur densité du système à N particules converge dans \mathfrak{S}_1 vers l'opérateur densité d'états décorés correspondant à l'état fondamental du modèle de Hartree. On prendra désormais $w \in L^\infty$.

Définition 29. Pour un état représentant N particules, $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$, on définit la matrice densité (ou opérateur densité) de k particules associée comme l'opérateur $\Gamma_\Psi^{(k)}$ sur $L^2(\mathbb{R}^{3k})$ de noyau :

$$\gamma_\Psi^{(k)}(x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_k) = \int \Psi(x_1, \dots, x_k, z_{k+1}, \dots, z_N) \overline{\Psi(y_1, \dots, y_k, z_{k+1}, \dots, z_N)} dz_{k+1} \dots dz_N.$$

Voici d'abord quelques définitions et propriétés sur les opérateurs à trace. Étant donné un Hilbert \mathfrak{H} , on note $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$ l'ensemble des opérateurs bornés sur \mathfrak{H} , K l'ensemble des opérateurs compacts. Pour $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$, on note $|A|$ l'unique opérateur positif dont le carré est A^*A . Pour un opérateur positif T , on définit : $\text{tr}(T) = \sum_{i=1}^\infty \langle u_i, Tu_i \rangle$ où (u_i) est une base de Hilbert de \mathfrak{H} , cette quantité (éventuellement infinie) ne dépend pas de la base. On note alors \mathfrak{S}_1 l'ensemble des opérateurs $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$ tels que $\text{tr}(|A|) < \infty$, et on a $\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^\infty \langle u_i, Au_i \rangle = \sum_{i=1}^\infty \mu_i(A)$ où $(\mu_i(A))_i$ sont les valeurs singulières de A , c'est à dire les valeurs propres de $|A|$. \mathfrak{S}_1 est un *-idéal bilatère de $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$.

Proposition 30. Quelques propriétés sur $\Gamma_\Psi^{(k)}$:

- $\Gamma_\Psi^{(k)}$ est borné et symétrique, donc autoadjoint.
- $\Gamma_\Psi^{(k)} \geq 0$
- $\Gamma_\Psi^{(k)} \in \mathfrak{S}_1$ et $\text{tr}(\Gamma_\Psi^{(k)}) = 1$
- $\rho^{(k)}(x_1, \dots, x_k) = \gamma_\Psi^{(k)}(x_1, \dots, x_k; x_1, \dots, x_k)$
- $\mathcal{F} \Gamma_\Psi^{(k)} \mathcal{F}^{-1} = \Gamma_{\mathcal{F}\Psi}^{(k)}$, il s'en suit que $t_\Psi^{(k)}(p_1, \dots, p_N) = \mathcal{F} \gamma_\Psi^{(k)}(p_1, \dots, p_N, p_1, \dots, p_N)$

Fort de ces nouveaux outils, on peut ré-écrire l'énergie d'un état quantique de la manière suivante.

Proposition 31.

$$\mathcal{E}(\Psi) = N \left[\text{tr}_{L^2} [(-\Delta + V)\Gamma_\Psi^{(1)}] + \frac{1}{2} \text{tr}_{L^2_S(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)} [w \Gamma_\Psi^{(2)}] \right]$$

Le sens du premier terme est ambigu car, bien que $\Gamma_\Psi^{(1)}$ soit dans \mathfrak{S}_1 qui est un *-idéal dans $\mathcal{L}(L^2)$, $-\Delta + V$ n'est pas borné. Cependant, le produit d'opérateur est défini sur tout L^2 quand $\Psi \in H^2$. De plus, la résolvante de $-\Delta + V$ est compacte : ce résultat est essentiellement du au caractère confinant de V , c'est une conséquence du théorème de Lax-Milgram ainsi que du Lemme 10. Étant symétrique et positif on peut trouver une base orthonormée (u_i) et des réelles positifs tendant en croissant vers l'infini $(\lambda_i)_i$ tels que $-\Delta + V = \sum_{i=1}^\infty \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|$. Alors $\text{tr}_{L^2} [(-\Delta + V)\Gamma_\Psi^{(1)}] := \sum_i \lambda_i \langle u_i | \Gamma_\Psi^{(1)} | u_i \rangle = \int -\Delta \gamma_\Psi^{(1)}(x, x) + V \gamma_\Psi^{(1)}(x, x)$.

Cette dernière égalité ce justifie de la manière suivante. Donnons nous une base de L^2 : $(\varphi_i)_i$, alors $((x, y) \rightarrow \varphi_p(x) \overline{\varphi_q(y)})$ est une de $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$. Écrivons $\gamma_\Psi^{(1)}(x, y) = \sum_{p,q} c_{p,q} \varphi_p(x) \overline{\varphi_q(y)}$. Alors $\text{tr}(\Gamma_\Psi^{(1)}) = \sum_p c_{p,p}$. D'autre part : $\int \gamma_\Psi^{(1)}(x, x) dx = \int \sum_{p,q} c_{p,q} \varphi_p(x) \overline{\varphi_q(x)} dx = \sum_p c_{p,p}$. L'intégrale le long de la diagonale est bien définie par la forme de $\gamma_\Psi^{(1)}$. Les mêmes calculs mènent au résultat pour $(-\Delta + V)\Gamma_\Psi^{(1)}$ qui a pour noyau $-\Delta_x \gamma_\Psi^{(1)} + V \gamma_\Psi^{(1)}$ et donne donc un sens à l'intégrale le long de la diagonale.

Enfin, on désigne par w l'opérateur de multiplication par $w(x-y)$. Alors comme $w \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ l'opérateur w est borné et cela donne un sens à $\text{tr}_{L^2_S(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)} [w \Gamma_\Psi^{(2)}]$.

Théorème 32. Si Ψ_N minimise \mathcal{E} sur $S(0,1)_{L^2(\mathbb{R}^{3N})}$. Alors, à extraction près, pour tout entier k on a : $\Gamma_{\Psi_N}^{(k)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Gamma^{(k)}$ dans \mathfrak{S}_1 . Et la famille $(\Gamma^{(k)})_k$ vérifie $\text{tr}_k(\Gamma^{(k)}) = \Gamma^{(k-1)}$.

Remarque 33. Le sens de cette dernière égalité ($\text{tr}_k(\Gamma^{(k)}) = \Gamma^{(k-1)}$) est donné à la Définition 36.

Démonstration. **Convergence de $(\Gamma_N^{(1)})$**

La suite $(\Gamma_{\Psi_N}^{(1)})_N$ est bornée dans $\mathfrak{S}_1 = K^*$ car $\Gamma_N^{(1)} \geq 0$, $\text{tr}(\Gamma_N^{(1)}) = 1 = \|\Gamma_N^{(1)}\|_{\mathfrak{S}_1}$. On peut ainsi en extraire une sous-suite convergeant faiblement $\Gamma_N^{(1)} \rightharpoonup^* \Gamma^{(1)}$. Comme $|u_i\rangle\langle u_i| \in K$: $\text{tr}(|u_i\rangle\langle u_i| \Gamma_N^{(1)}) = \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle \rightarrow \langle u_i | \Gamma^{(1)} | u_i \rangle$.

On a par ailleurs $\sum_i \lambda_i \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle \geq \lambda_1 \sum_i \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle$ et $(\sum_i \lambda_i \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle)_N$ est bornée uniformément, disons par C , or $(\lambda_i)_i$ croit vers l'infini donc : $\lambda_j \sum_{i \geq j} \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle \leq \sum_{i \geq j} \lambda_i \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle \leq C$ et $\sum_{i \geq j} \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle \leq \frac{C}{\lambda_j} \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 0$, uniformément par rapport à N .

D'après ce qui précède, en coupant la somme en deux on montre aisément que $\text{tr}(\Gamma_N^{(1)}) \rightarrow \text{tr}(\Gamma^{(1)})$. Cependant, la convergence forte dans \mathfrak{S}_1 n'est pas évidente pour autant, il faut montrer que $\text{tr}(|\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)}|) \rightarrow 0$. On a recours au lemme suivant :

Lemme 34. Pour A et $B \in \mathfrak{S}_1$ et $C \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$ on a :

- $\text{tr}(|A + B|) \leq \text{tr}(|A|) + \text{tr}(|B|)$
- $\text{tr}(|AC|) \leq \|C\| \text{tr}(|A|)$ et $\text{tr}(|CA|) \leq \|C\| \text{tr}(|A|)$

Lemme 35. Pour $A \in \mathfrak{S}_1$ on a $\text{tr}(|A|) \leq \|A\| \text{tr}(A^*A)$

Démonstration. La démonstration repose sur l'égalité $\text{tr}(|A|) = \sum_k \mu_k$, où (μ_k) est la suite des valeurs singulières de A . \square

Notons P_j le projecteur orthogonal sur $\text{vect}(u_i)_{i \leq j}$. Alors d'après le premier lemme, on a $\text{tr}(|\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)}|) \leq \text{tr}(|(\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)})P_j|) + \text{tr}(|(\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)})P_j^\perp|)$. Mais, en appliquant successivement les lemmes précédents on majore le second terme comme suit :

$$\begin{aligned} \text{tr}(|(\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)})P_j^\perp|) &\leq \text{tr}(|\Gamma_N^{(1)}P_j^\perp|) + \text{tr}(|\Gamma^{(1)}P_j^\perp|) \leq \|\Gamma_N^{(1)}\| \text{tr}(P_j^\perp(\Gamma_N^{(1)})^2P_j^\perp) + \|\Gamma^{(1)}\| \text{tr}(P_j^\perp(\Gamma^{(1)})^2P_j^\perp) \\ &\leq \|\Gamma_N^{(1)}\|^2 \text{tr}(\Gamma_N^{(1)}P_j^\perp) + \|\Gamma^{(1)}\|^2 \text{tr}(\Gamma^{(1)}P_j^\perp) \\ &\leq C \left(\sum_{i > j} \langle u_i | \Gamma_N^{(1)} | u_i \rangle + \sum_{i > j} \langle u_i | \Gamma^{(1)} | u_i \rangle \right) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Fixons alors $\epsilon > 0$ et j tel que le second terme soit inférieur à $\epsilon/2$, pour tout entier N . Minorons alors le premier terme à j fixé. Posons $A = (\Gamma_N^{(1)} - \Gamma^{(1)})P_j$. On a $\text{tr}(|A|) = \sum_{i=1}^j \mu_i(A)$ et $\text{tr}(A^*A) = \sum_{i=1}^j \langle u_i, A^*A u_i \rangle = \sum_{i=1}^j \langle Au_i, Au_i \rangle = \sum_{i,k}^j |(u_k, Au_i)|^2$. Or, la convergence faible-* de $\Gamma_N^{(1)}$ entraîne la convergence vers 0 de tous les termes de cette somme (finie). On peut donc trouver N_0 tel que la somme soit plus petite que $\epsilon/2$ à partir de ce rang. Ceci montre la convergence de $(\Gamma_N^{(1)})_N$ (à extraction près).

Convergence de $\Gamma_N^{(k)}$

On applique le même raisonnement. Il suffit de remarquer que $\text{tr}_{L^2}(-\Delta + V)\Gamma_N^{(1)} = \frac{1}{k} \text{tr}_{L^2_{\mathbb{S}}((\mathbb{R}^3)^k)}((-\Delta_{x_1} + V(x_1) + \dots - \Delta_{x_k} + V(x_k))\Gamma_N^{(k)}) = \frac{1}{k} \text{tr}((-\Delta + \tilde{V})\Gamma_N^{(k)})$ où \tilde{V} est aussi confinant. ce qui entraîne que $-\Delta + \tilde{V}$ est diagonalisable en base orthonormée et que ses valeurs propres tendent vers l'infini.

Enfin, en réalisant une extraction diagonale, on trouve une sous-suite de $(\Gamma_N^{(k)})_N$ qui converge pour tout k . \square

La propriété de trace n'a pas encore été prouvée, c'est le but de ce qui suit.

Propriété des $\Gamma^{(k)}$ relatifs à la trace partielle

Définition 36. On définit la trace partielle par dualité. Pour $T_{1,2} \in \mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2)$, l'application $K(\mathfrak{H}_1) \ni A \mapsto \text{tr}((A \otimes 1) T_{1,2})$ est une forme linéaire continue sur K , elle admet donc un représentant pour la trace dans $\mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_1) = K(\mathfrak{H}_1)^*$. Notons le T_1 .

$$T_1 := \text{tr}_2(T_{1,2})$$

Trace partielle d'opérateurs à noyau

Soit $(u_i)_i$ une base de $\mathcal{L}(\mathfrak{H}_1)$ Posons $A_{i,j} = |u_i\rangle\langle u_j| \in K(\mathfrak{H}_1)$. Soit $T \in \mathfrak{S}_1$ un opérateur de noyau $t(x_1, x_2, y_1, y_2)$. Alors : $\forall i, j \text{ tr}(A_{i,j} \otimes 1 T) = \int u_j(x_1) \bar{u}_i(z_1) (\int t(z_1, x_2; x_1, x_2) dx_2) dx_1 dz_1$. Ainsi, $\text{tr}_1(T)$ est l'opérateur à noyau $\int t(x_1, z, y_1, z) dz$.

On a donc bien $\Gamma_N^{(k-1)} = \text{tr}_k(\Gamma_N^{(k)})$. Montrons que $(\Gamma^{(k)})$ hérite de cette propriété. Soit $A \in K$, alors $\text{tr}(A \otimes 1 \Gamma_N^{(k)}) = \text{tr}(A \Gamma_N^{(k-1)})$, comme les $(\Gamma_N^{(k)})$ convergent fortement dans \mathfrak{S}_1 , en passant à la limite quand $N \rightarrow \infty$ on a l'égalité : $\text{tr}(A \otimes 1 \Gamma^{(k)}) = \text{tr}(A \Gamma^{(k-1)})$. A étant arbitraire dans K , il s'en suit que $\Gamma^{(k-1)} = \text{tr}_k(\Gamma^{(k)})$. Ce qui termine la démonstration du théorème.

Il vient :

$$\frac{\mathcal{E}(\Psi_N)}{N} = \frac{1}{2} \text{tr}_{L_S^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)} [(-\Delta + \tilde{V} + w) \Gamma_N^{(2)}].$$

Le lemme de Fatou pour les séries donne : $\liminf \frac{\mathcal{E}(\Psi_N)}{N} \geq \frac{1}{2} \text{tr}((-\Delta + \tilde{V} + w) \Gamma^{(2)})$. Une question naturelle est alors : $\Gamma^{(k)}$ est-il la matrice densité d'un état quantique du système ?

Théorème de structure

Le théorème de De Finetti quantique donne la structure de telles familles d'opérateurs : $A_{k-1} = \text{tr}_k(A_k)$.

Théorème 37. Théorème de De Finetti quantique [4]

Soit (A_k) une famille d'opérateurs auto-adjoints positifs sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ vérifiant $A_{k-1} = \text{tr}_k(A_k)$ et $\text{tr}(A_1) = 1$. Alors, il existe une mesure de probabilité de Borel μ sur la sphère de $L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que

$$A_k = \int_{S(0,1)_{L^2}} |u^{\otimes k}\rangle\langle u^{\otimes k}| d\mu(u).$$

Il est clair que le théorème principal sur la condensation suit du théorème de De Finetti quantique. En effet, $\frac{1}{2} \text{tr} [(-\Delta + \tilde{V} + w) \Gamma^{(2)}] = \int \frac{1}{2} \langle u^{\otimes 2} | (-\Delta + \tilde{V} + w) | u^{\otimes 2} \rangle d\mu(u) = \int \mathcal{E}_H(u) d\mu(u) \geq 1 \times e_H = e_H$. Ce qui impose à μ d'être la mesure de Dirac supportée par u_0 , état fondamental du modèle de Hartree. Nous allons maintenant donner la preuve du théorème 4.2 en commençant par le cas plus simple de la dimension finie.

4.2.1 Cas de la dimension finie

Dans ce qui suit, on montre un version du théorème où L^2 est remplacé par un Hilbert \mathfrak{H} de dimension finie. L'idée est d'estimer la différence entre l'opérateur γ^k et la moyenne sur les opérateurs produit d'une certaine mesure μ_N . L'outil principal est la représentation intégrale de l'identité par le groupe orthogonal produit, c'est une application du lemme de Schur. Il faut néanmoins montrer l'irréductibilité du groupe orthogonal produit.

Définition 38. Soit \mathfrak{H} un Hilbert, on note $\bigotimes_{i=1}^N \mathfrak{H} = \mathfrak{H}^{\otimes N}$ le produit tensoriel de \mathfrak{H} par lui même N fois. On note $\mathfrak{H}_S^{\otimes N}$ le produit tensoriel symétrique de \mathfrak{H} par lui même. C'est le sous espace vectoriel de $\mathfrak{H}^{\otimes N}$ défini de la manière suivante. Si $(u_i)_{1 \leq i \leq d}$ est une base de \mathfrak{H} , alors $x = \lambda_{i_1, \dots, i_N} u_{i_1} \otimes \dots \otimes u_{i_N} \in \mathfrak{H}_S^{\otimes N}$ si et seulement

si $\forall \sigma \in \mathcal{S}_N : \lambda_{\sigma(i_1), \dots, \sigma(i_N)} = \lambda_{i_1, \dots, i_N}$. Cette propriété ne dépend pas de la base $(u_i)_{1 \leq i \leq d}$ choisie. $\mathfrak{H}_S^{\otimes N}$ est un sous-espace de dimension $\binom{N+d-1}{d-1}$

Remarque 39. $\mathfrak{H}_S^{\otimes N} \cong \mathfrak{H}^{\otimes N} / \mathcal{R}$ où \mathcal{R} est la relation d'équivalence définie par : $u_{i_1} \otimes \dots \otimes u_{i_N} \stackrel{\mathcal{R}}{=} u_{i_{\sigma(1)}} \otimes \dots \otimes u_{i_{\sigma(N)}}$ pour $\sigma \in \mathcal{S}_N$. Dorénavant, sur $\mathfrak{H}_S^{\otimes N}$, on utilisera l'abus de notation qui consiste à rendre le produit tensoriel commutatif.

Théorème 40 (De Finetti en dimension finie). Soit \mathfrak{H} un Hilbert de dimension d et $(\gamma^k)_k$ une suite d'opérateurs positifs chacun défini sur $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$ et vérifiant la propriété $\text{tr}_k(\gamma^k) = \gamma^{(k-1)}$. Alors il existe une mesure de probabilité μ sur $S\mathfrak{H}$, la sphère unité de \mathfrak{H} , telle que

$$\forall k, \gamma^k = \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu(u).$$

La démonstration du théorème s'appuie fortement sur le lemme suivant.

Lemme 41. On note P la mesure de probabilité uniforme sur $S\mathfrak{H}$. Alors

$$P := \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| du = \frac{1}{c_N} \text{Id}_{\mathfrak{H}_S^{\otimes k}}.$$

Où $c_k = \binom{k+d-1}{d-1}$, la dimension de $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$.

Démonstration. Remarquons que pour $U \in O(\mathfrak{H})$, $du^*U = du$, et donc

$$U^{\otimes k} \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| du = \int_{S\mathfrak{H}} |(uU^*)^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| du = \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| du U^{\otimes k}.$$

Ainsi P commute avec tout élément de la forme $U^{\otimes k}, U \in O(\mathfrak{H})$. L'espace $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$ est clairement stable par $O(\mathfrak{H})^k := \{U^{\otimes k}, U \in O(\mathfrak{H})\}$, montrons qu'il n'admet pas de sous-espace propre stable par $O(\mathfrak{H})^k$. Soit V un tel sous-espace et $V \ni X = \sum_{\alpha_1 + \dots + \alpha_d = k} a_\alpha u_1^{\otimes \alpha_1} \otimes \dots \otimes u_d^{\otimes \alpha_d} \neq 0$. Soit alors $\alpha^0 = (\alpha_1^0, \dots, \alpha_d^0)$ tel que $a_{\alpha^0} \neq 0$.

Considérons $U(\theta_1, \dots, \theta_d) \in O(\mathfrak{H}) : u_k \mapsto e^{i\theta_k} u_k$, alors

$$U^{\otimes k} X = \sum_{\alpha_1 + \dots + \alpha_d = k} a_\alpha e^{i\alpha_1 \theta_1 + \dots + i\alpha_k \theta_k} u_1^{\otimes \alpha_1} \otimes \dots \otimes u_d^{\otimes \alpha_d} \in V.$$

Donc

$$u_1^{\otimes \alpha_1^0} \otimes \dots \otimes u_d^{\otimes \alpha_d^0} = \frac{1}{\alpha^0} \int U^{\otimes k}(\theta_1, \dots, \theta_d) X e^{-i\alpha_1^0 \theta_1 - \dots - i\alpha_k^0 \theta_k} d\theta_1 \dots d\theta_d \in V.$$

Notons alors $U_i \in O(\mathfrak{H}), u_1 \mapsto \frac{u_1 + u_i}{\sqrt{2}}, u_i \mapsto \frac{u_1 - u_i}{\sqrt{2}}, u_j \mapsto u_j$ si $j \neq i, 1$. On a $U_2 \dots U_k X = u_1^{\otimes N} + u^{\otimes N-1} \otimes (\dots)$. La même procédure que précédemment montre que $u^{\otimes N} \in V$. Enfin, en considérant un élément $U'(\theta_1, \dots, \theta_d) \in O(\mathfrak{H})$ tel que $u_1 \mapsto \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=1}^d e^{i\theta_j} u_j$, il vient

$$U'^{\otimes k} u^{\otimes k} = \left(\frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=1}^d e^{i\theta_j} u_j \right)^{\otimes k} = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{\alpha_1 + \dots + \alpha_d = k} e^{i\alpha_1 \theta_1 + \dots + i\alpha_d \theta_d} u_1^{\otimes \alpha_1} \otimes \dots \otimes u_d^{\otimes \alpha_d} \in V.$$

Par ailleurs on a

$$u_1^{\otimes \alpha_1} \otimes \dots \otimes u_d^{\otimes \alpha_d} = \int U'^{\otimes k}(\theta_1, \dots, \theta_d) u^{\otimes k} e^{-i\alpha_1 \theta_1 - \dots - i\alpha_d \theta_d} d\theta_1 \dots d\theta_d \in V,$$

pour tout $(\alpha_1, \dots, \alpha_d)$. Ce qui montre que $V = \mathfrak{H}_S^{\otimes k}$ et que $O(\mathfrak{H})^k$ est irréductible sur $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$. D'après le lemme de Schur, P est une homothétie, de trace 1, ce qui conclut la démonstration. \square

Démonstration. (du théorème)

Notons $P_k = |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}|$, le projecteur orthogonal sur $u^{\otimes k}$. D'après le Lemme 41, $1_N = 1_k \otimes 1_{N-k} = 1_k \otimes (\int c_{N-k} P_{N-k} du)$. On peut donc réécrire γ^k comme

$$\gamma^k = \text{tr}_{k+1 \rightarrow N}(\gamma^N) = \text{tr}_{k+1 \rightarrow N} (1_k \otimes (\int c_{N-k} P_{N-k} du) \gamma^N) = c_{N-k} \int \text{tr}_{k+1 \rightarrow N} (1_k \otimes (P_{N-k}) \gamma^N).$$

Posons alors : $\mu_N(u) du = c_N \text{tr}(P_N \gamma^N) du$, cela définit une mesure de probabilité. Comparons γ^k et $\int P_k \mu_N(u) du$:

$$\int P_k \mu_N(u) du = c_N \int P_k \text{tr}_{k+1 \rightarrow N} (1_k \otimes P_{N-k} \gamma^N) P_k du,$$

car $\text{tr}(P_N \gamma^N) = \text{tr}((1_{N-k} \otimes P_k)(P_{N-k} \otimes 1_k) \gamma^N) = \text{tr}(P_k \text{tr}_{k+1 \rightarrow N}(P_{N-k} \otimes 1_k \gamma^N)) = \langle u^{\otimes k} | \text{tr}_{k+1 \rightarrow N}(1_k \otimes P_{N-k} \gamma^N) | u^{\otimes k} \rangle$.
En posant : $A = \text{tr}_{k+1 \rightarrow N}(1_k \otimes P_{N-k} \gamma^N)$ et $B = P_k$ et en s'aidant de l'identité

$$A - BAB = (A - BA) + (A - AB) - (1 - B)A(1 - B),$$

on a

$$\begin{aligned} \text{tr} \left(\left| \gamma^k - \int P_k \mu_N(u) du \right| \right) &\leq \text{tr} \left(\left| \gamma^k - \frac{c_{N-k}}{c_N} \int P_k \mu_N(u) du \right| \right) + \text{tr} \left(\left| \left(1 - \frac{c_{N-k}}{c_N}\right) \int P_k \mu_N(u) du \right| \right) \\ &\leq 2 \text{tr} \left(\left| \int A - B A du \right| \right) + \text{tr}(|(1 - B)A(1 - B)|) + \left(1 - \frac{c_{N-k}}{c_N}\right). \end{aligned}$$

Or :

- $\int A - B A du = \int A - AB du = \left(1 - \frac{c_{N-k}}{c_N}\right) \gamma^k$
- $\text{tr}(|\int (1 - B)A(1 - B)|) \leq \int \text{tr}(|(1 - B)A(1 - B)|) = \int \text{tr}(|A(1 - B)|)$ car $1 - B$ est un projecteur orthogonal.

Ainsi $\text{tr}(|\gamma^k - \int |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| \mu_N(u) du|) \leq 4\left(1 - \frac{c_{N-k}}{c_N}\right)$ et $c_N = \binom{N+d-1}{N} \sim \frac{N^{d-1}}{(d-1)!}$, ce qui entraîne $\left(1 - \frac{c_{N-k}}{c_N}\right) \rightarrow 0$. Il suffit d'extraire une sous-suite de $(\mu_N)_N$ qui converge faiblement vers une mesure de probabilité μ , cette mesure convient. □

Remarque 42. $\mathfrak{H}_S^{\otimes N}$ s'injecte dans $\mathfrak{H}^{\otimes N}$, on peut alors reformuler les hypothèses du théorème par : $(\gamma^k)_k$ une famille d'opérateurs agissant chacun sur $\mathfrak{H}^{\otimes k}$ laissant stable $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$ et le résultat final serait restreint à $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$. On remarque alors que l'on peut remplacer $\mathfrak{H}_S^{\otimes k}$ par tout sous-espace de $\mathfrak{H}^{\otimes k}$ sur lequel le groupe orthogonal est irréductible puisque cette hypothèse ne sert qu'à la démonstration du Lemme 41.

4.2.2 Cas de la dimension quelconque

La démonstration suivante repose sur le fait que dans certains espaces convexes, tout point est le barycentre d'une certaine mesure supportée par l'ensemble des points extrémaux, c'est le Théorème de Choquet [3, Thm 27.6]. Le schéma de la preuve suit [4] dont le résultat est plus général.

Théorème 43. Soit E un espace métrique localement convexe séparé et $X \subset E$ convexe et compact métrique. Alors pour tout $x \in X$, il existe une mesure de probabilité μ sur X supportée par $\mathcal{E}(X)$ l'ensemble des points extrémaux de X telle que $x = \int_{\mathcal{E}(X)} e d\mu(e)$.

- Prenons $E = \mathfrak{S}_1$ et considérons l'ensemble Λ des suites $(\gamma^k)_k$ telles que :
- $\gamma^k \in \mathcal{L}(\mathfrak{H}^{\otimes k})$
 - $\text{tr}(\gamma^{(1)}) = 1$

- $\text{tr}_k(\gamma^{(k)}) = \gamma^{(k-1)}$
- $\gamma^{(k)} \geq 0$
- $\forall A_i \in \mathcal{L}(\mathfrak{H}), \sigma \in S_k : \text{tr}(\gamma^{(k)} A_1 \otimes \dots \otimes A_k) = \text{tr}(\gamma^k A_{\sigma(1)} \otimes \dots \otimes A_{\sigma(k)})$
- $\text{tr}((-\Delta + V)\gamma^{(1)}) \leq C$, où C est une constante quelconque.

Λ est clairement un convexe et le Théorème 32 montre que c'est un compact métrique pour $\text{tr}(|\cdot|)$. Pour montrer le résultat, il reste à établir que ses points extrémaux sont les états produits purs $(\gamma^k) = ((\gamma^1)^{\otimes k})$ où γ^1 est un opérateur à densité issu d'une fonction d'onde Ψ .

Proposition 44 (Points extrémaux). *Les points extrémaux de Λ sont des états produits de Λ .*

Démonstration. Soit $(\gamma^k)_k$ un point extrémal de Λ , supposons qu'il n'est pas un état produit. Alors on peut trouver $A_m \in \mathcal{L}(\mathfrak{H}^{\otimes m}), A_n \in \mathfrak{H}^{\otimes n}$ tels que $\text{tr}(\gamma^{m+n} A_m \otimes A_n) \neq \text{tr}(\gamma^m A_m) \text{tr}(\gamma^n A_n)$. Quitte à multiplier par un scalaire, on peut supposer $\frac{1}{3} \leq \text{tr}(\gamma^m A_m) \leq \frac{2}{3}$. Définissons alors deux nouvelles suites σ et τ par

$$\sigma_k = \frac{1}{\text{tr}(\gamma^m A_m)} \gamma^{m+k} (A_m \otimes 1_k) i_k \rightarrow_{m+k}$$

et

$$\tau_k = \frac{1}{1 - \text{tr}(\gamma^m A_m)} \gamma^{m+k} ((1_m - A_m) \otimes 1_k) i_k \rightarrow_{m+k}.$$

On a $\gamma = \text{tr}(\gamma^m A_m) \sigma + (1 - \text{tr}(\gamma^m A_m)) \tau$, comme γ est un point extrémal et que la combinaison convexe est non triviale $\sigma = \tau$, et particulier $\sigma^n(A_n) = \tau^n(A_n)$ et donc $\text{tr}(\gamma^{m+n} A_m \otimes A_n) = \text{tr}(\gamma^m A_m) \text{tr}(\gamma^n A_n)$, ce qui est une contradiction. \square

Remarque 45. *La réciproque est aussi vraie, c'est-à-dire que les états produits de Λ sont des points extrémaux, mais nous n'en avons pas besoins pour montrer le théorème.*

Montrons maintenant qu'un état produit de Λ est nécessairement pur, c'est à dire qu'il existe $\Psi \in \mathfrak{H}$ tel que $\gamma^1 = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. En effet, soit $(\gamma^{\otimes k}) \in \Lambda$ un état produit. Puisque $\gamma \in \mathfrak{S}_1$, il est compact et admet une décomposition de la forme $\gamma = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i |u_i\rangle\langle u_i|$, où $\mu_i \geq 0$ et $(u_i)_i$ est une famille de vecteurs orthonormés. Si γ n'est pas un état pur, il existe des réels $0 < \mu_j < 1$ et $\gamma = \mu_j |u_j\rangle\langle u_j| + (1 - \mu_j)(1 - \mu_j)^{-1} \sum_{i \neq j} \mu_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mu \rho_1 + (1 - \mu) \rho_2$ où ρ_i est un opérateur à densité. Soit $E_n = (n!)^{-1} \sum_{\sigma \in S_n} U_\sigma$ le projecteur sur les opérateurs à symétrie de Bose-Einstein. Pour un opérateur à densité ρ et un projecteur E on a $\text{tr}(E\rho) \leq 1$ et égalité si et seulement si $E\rho = \rho$. Et puisque $\rho_1 \otimes \rho_2$ et $\rho_2 \otimes \rho_2$ ne sont pas à symétrie de Bose-Einstein

$$\begin{aligned} \text{tr}(E_2 \gamma \otimes \gamma) &= \mu^2 \text{tr}(E_2 \rho_1 \otimes \rho_1) + \mu(1 - \mu) \text{tr}(E_2 \rho_1 \otimes \rho_2) + \mu(1 - \mu) \text{tr}(E_2 \rho_2 \otimes \rho_1) + (1 - \mu)^2 \text{tr}(\rho_2 \otimes \rho_2) \\ &< \mu^2 + 2\mu(1 - \mu) + (1 - \mu)^2 = 1. \end{aligned}$$

Ce qui contredit le fait que γ^2 soit à symétrie de Bose-Einstein. Les états extrémaux de Λ sont donc les états purs, c'est-à-dire les éléments de la forme $(|u^{\otimes k}\rangle\langle u^{\otimes k}|)$.

Remarque 46. *Ceci montre un résultat plus faible que le théorème de De Finetti quantique, en effet l'ensemble Λ est composé d'opérateurs dont l'énergie est uniformément bornée, c'est ce qui le rend compact métrique et qui permet d'utiliser le théorème de Choquet.*

Remerciements

Je tiens à remercier mon directeur de stage M. Lewin pour la disponibilité qu'il m'a accordée, la pédagogie dont il a fait preuve ainsi que la bienveillance qu'il m'a témoignée ; elles ont permis à ce stage d'être une expérience à la fois enrichissante et agréable. Je remercie aussi Julien Sabin, doctorant sous la direction de M. Lewin, pour ses nombreux conseils et explications. Enfin, je remercie l'université de Cergy-Pontoise et l'Institut Henri Poincaré pour m'avoir accueilli.

Références

- [1] BOSE, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Zeitschrift fur Physik, 26 (1924), pp. 178–181.
- [2] H. BREZIS, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, universi-text ed., 2010.
- [3] G. CHOQUET, *Lectures on analysis. Vol 2. Representation theory*, Mathematics lecture note series, W.A. Benjamin, Inc, New York, 1969.
- [4] R. L. HUDSON AND G. R. MOODY, *Locally normal symmetric states and an analogue of de Finetti's theorem*, Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete, 33 (1975/76), pp. 343–351.
- [5] M. LEWIN, P. T. NAM, AND N. ROUGERIE, *Derivation of Hartree's theory for generic mean-field Bose gases*, preprint arXiv, (2013). preprint arXiv.
- [6] E. H. LIEB AND M. LOSS, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2001.
- [7] M. REED AND B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional analysis*, Academic Press, 1972.