Inégalités et limites semi-classiques

Arnaud Triay
Stage effectué à l'Université Paris-Dauphine en Juin-Juillet 2014
sous la direction de Mathieu LEWIN (CNRS & Université de Cergy-Pontoise)

UNIVERSITÉ de Cergy-Pontoise

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE LYON

Un peu de mécanique quantique

Description classique

Une particule évolue dans l'espace des phases $M = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
L'énergie $\mathcal{E}_{cl}(x, p) = p^2 + V(x)$ où V est un potentiel extérieur.

Un peu de mécanique quantique

Description classique

Une particule évolue dans l'espace des phases $M = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
L'énergie $\mathcal{E}_{cl}(x, p) = p^2 + V(x)$ où V est un potentiel extérieur.

Description quantique

Les objets quantiques sont décrits par une mesure probabilité (état quantique) contrairement aux objets classiques qui sont décrits par des mesures exactes.

Fonction d'onde

$\Psi \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ décrit totalement l'état de la particule
$|\Psi(x)^2|$ s'interprète comme la densité de probabilité de la loi de position de la particule.

Un peu de mécanique quantique

Description classique

Une particule évolue dans l'espace des phases $M = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
L'énergie $\mathcal{E}_{cl}(x, p) = p^2 + V(x)$ où V est un potentiel extérieur.

Description quantique

Les objets quantiques sont décrits par une mesure probabilité (état quantique) contrairement aux objets classiques qui sont décrits par des mesures exactes.

Fonction d'onde

$\Psi \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ décrit totalement l'état de la particule
$|\Psi(x)^2|$ s'interprète comme la densité de probabilité de la loi de position de la particule.

Impulsion

$|\hat{\Psi}(p)|^2$ s'interprète comme la densité de la loi de probabilité d'impulsion de la particule.

Un peu de mécanique quantique

Description classique

Une particule évolue dans l'espace des phases $M = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
L'énergie $\mathcal{E}_{cl}(x,p) = p^2 + V(x)$ où V est un potentiel extérieur.

Description quantique

Les objets quantiques sont décrits par une mesure probabilité (état quantique) contrairement aux objets classiques qui sont décrits par des mesures exactes.

Fonction d'onde

$\Psi \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ décrit totalement l'état de la particule
$|\Psi(x)^2|$ s'interprète comme la densité de probabilité de la loi de position de la particule.

Impulsion

$|\hat{\Psi}(p)|^2$ s'interprète comme la densité de la loi de probabilité d'impulsion de la particule.

Énergie d'une particule quantique $\mathcal{E}_q(\Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ où $H = -\Delta + V$.
Position et énergie cinétique moyenne

$$\langle \Psi | x | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} x |\Psi(x)|^2 dx,$$

$$\langle \Psi | (-i\hbar\nabla)^2 | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \Psi(x)|^2 dx.$$

Première quantification

Observable classique $\longmapsto$ observable quantique

Axiomes

- $Q : a \mapsto A$ est linéaire, A est un opérateur autoadjoint et $Q(1) = 1_{L^2}$
- X_j est l'opérateur de multiplication par x_j
- P_j est l'opérateur $-i\hbar\partial_{x_j}$
- $\lim_{\hbar \to 0} \left(\frac{i}{\hbar}[A, B] - Q(\{A, B\}) \right) = 0$, où $[A, B]$ est le commutateur de A et B et $\{a, b\} = \nabla_x a \cdot \nabla_p b - \nabla_x b \cdot \nabla_p a$ est le crochet de Poisson de a et b.

Première quantification

Observable classique $\longmapsto$ observable quantique

Axiomes

- $Q : a \mapsto A$ est linéaire, A est un opérateur autoadjoint et $Q(1) = 1_{L^2}$
- X_j est l'opérateur de multiplication par x_j
- P_j est l'opérateur $-i\hbar\partial_{x_j}$
- $\lim_{\hbar\to 0}\left(\frac{i}{\hbar}[A,B] - Q(\{A,B\})\right) = 0$, où $[A,B]$ est le commutateur de A et B et $\{a,b\} = \nabla_x a \cdot \nabla_p b - \nabla_x b \cdot \nabla_p a$ est le crochet de Poisson de a et b.

Non unicité de Q

Pour $f, g \in L^p$,

$$Q_1(f(x)g(p)) = Q_1(f(x))\ \ Q_1(g(p)) \text{ ou}$$
$$Q_2(f(x)g(p)) = Q_2(g(p))\ Q_2(f(x))$$

On notera $f(x)g(-i\hbar\nabla)$ et $g(-i\hbar\nabla)f(x)$ ces opérateurs quand $Q(f(x))$ est l'opérateur de multiplication par f et $Q(g(p))$ est la multiplication par g en Fourier.

Première quantification

Observable classique $\longmapsto$ observable quantique

Axiomes

- $Q : a \mapsto A$ est linéaire, A est un opérateur autoadjoint et $Q(1) = 1_{L^2}$
- X_j est l'opérateur de multiplication par x_j
- P_j est l'opérateur $-i\hbar\partial_{x_j}$
- $\lim_{\hbar\to 0}\left(\frac{i}{\hbar}[A,B] - Q(\{A,B\})\right) = 0$, où $[A,B]$ est le commutateur de A et B et $\{a,b\} = \nabla_x a \cdot \nabla_p b - \nabla_x b \cdot \nabla_p a$ est le crochet de Poisson de a et b.

Non unicité de Q

Pour $f, g \in L^p$,

$$\begin{aligned} Q_1(f(x)g(p)) &= Q_1(f(x))\ \ Q_1(g(p)) \text{ ou} \\ Q_2(f(x)g(p)) &= Q_2(g(p))\ Q_2(f(x)) \end{aligned}$$

On notera $f(x)g(-i\hbar\nabla)$ et $g(-i\hbar\nabla)f(x)$ ces opérateurs quand $Q(f(x))$ est l'opérateur de multiplication par f et $Q(g(p))$ est la multiplication par g en Fourier.

Exemple

Hamiltonien $h(x,p) = p^2 + V(x) \longmapsto H = -\hbar^2\Delta + V(x)$

Espaces de Schatten

Classe trace

Soit A un opérateur borné, on note $|A| = \sqrt{A^*A}$ et on dit qu'il est de classe trace si

$$\operatorname{tr}(|A|) = \sum_k \langle |A| e_k, e_k \rangle < \infty$$

pour (e_k) une base hilbertienne. On note $A \in \mathcal{J}_1$.

Espaces de Schatten

Si A est un opérateur borné, on note $A \in \mathcal{J}_p$ si $\|A\|_p^p := \operatorname{tr}(|A|^p) < \infty$.

On note $\mathcal{J}_\infty$ l'idéal des opérateurs compacts (limites d'opérateurs de dimension finie).

Valeurs singulières

Les valeurs propres de $|A|$: $(s_n(A))$ sont appelées les valeurs singulières de A. On a $A \in \mathcal{J}_p$ si et seulement si $(s_n(A)) \in \ell^p$.

Opérateurs à noyau

Si A est l'opérateur à noyau sur $L^2(\mathbb{R}^d)$: $(Au)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \alpha(x,y)u(y)dy$, alors $A \in \mathcal{J}_2$ si et seulement si $\alpha \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. On a alors $\|A\|_2^2 = \operatorname{tr}(A^*A) = \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |\alpha(x,y)|^2 dxdy$.

Inégalité de Kato-Seiler-Simon

Les opérateurs $f(x)g(-i\hbar\nabla)$ et $g(-i\hbar\nabla)f(x)$

$$\big(f(x)g(-i\hbar\nabla)\varphi\big)(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} f(x)\check{g}\Big(\frac{y-x}{\hbar}\Big)\varphi(y)dy.$$

$$\big(g(-i\hbar\nabla)f(x)\varphi\big)(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} \check{g}\Big(\frac{y-x}{\hbar}\Big)f(y)\varphi(y)dy.$$

Théorème

Si $f, g \in L^2$ alors $f(x)g(-i\hbar\nabla) \in \mathcal{J}_2$ et

$$\|f(x)g(-i\hbar\nabla)\|_2 = \sqrt{\mathrm{tr}(|f(x)g(-i\hbar\nabla)|^2)} = (2\pi\hbar)^{-d}\|f\|_2\|g\|_2. \tag{1}$$

Si $f, g \in L^p$ pour $2 < p < \infty$ alors $f(x)g(-i\hbar\nabla) \in \mathcal{J}_p$ et

$$\|f(x)g(-i\hbar\nabla)\|_p = \mathrm{tr}(|f(x)g(-i\hbar\nabla)|^p)^{1/p} \leq (2\pi\hbar)^{-d}\|f\|_p\|g\|_p. \tag{2}$$

Schéma de preuve

On prend $\hbar = 1$, on suppose f, g à support compact puis on invoque un argument de densité pour conclure.

- Le cas $p = 2$ provient du fait que $f(x)\check{g}\left(\frac{y-x}{\hbar}\right) \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$

Schéma de preuve

On prend $\hbar = 1$, on suppose f, g à support compact puis on invoque un argument de densité pour conclure.

- Le cas $p = 2$ provient du fait que $f(x)\check{g}(\frac{y-x}{\hbar}) \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$
- Le cas $p = \infty$, on utilise $\langle \phi, f(x)g(-i\hbar\nabla)\psi\rangle = \langle \bar{f}\phi, (g\hat{\psi})\check{}\,\rangle$ pour prouver que $f(x)g(-i\hbar\nabla) \in \mathcal{J}_\infty$ si $f, g \in L^\infty_0$ (la fermeture de $L^2 \cap L^\infty$ dans L^∞) avec $\|f(x)g(-i\nabla)\|_\infty \leq \|f\|_\infty \|g\|_\infty$. Où $\|.\|_\infty$ dans le membre de gauche est la norme d'opérateur sur les compacts.

Schéma de preuve

On prend $\hbar = 1$, on suppose f, g à support compact puis on invoque un argument de densité pour conclure.

- Le cas $p = 2$ provient du fait que $f(x)\check{g}(\frac{y-x}{\hbar}) \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$
- Le cas $p = \infty$, on utilise $\langle \phi, f(x)g(-i\hbar\nabla)\psi\rangle = \langle \bar{f}\phi, (g\hat{\psi})\check{}\,\rangle$ pour prouver que $f(x)g(-i\hbar\nabla) \in \mathcal{J}_\infty$ si $f, g \in L^\infty_0$ (la fermeture de $L^2 \cap L^\infty$ dans L^∞) avec $\|f(x)g(-i\nabla)\|_\infty \leq \|f\|_\infty \|g\|_\infty$. Où $\|.\|_\infty$ dans le membre de gauche est la norme d'opérateur sur les compacts.
- Pour $2 < p < \infty$ on utilise une technique d'interpolation complexe. $F(z) = f(x)^{zp} g(-i\hbar\nabla)^{zp}$ définie sur $\{0 \leq \Re(z) \leq 1/2\}$ relie analytiquement $F(\Re(z) = 0)$ (opérateurs dans $\mathcal{J}_\infty$) à $F(\Re(z) = 1/2)$ (opérateurs dans $\mathcal{J}_2$).

Inégalité de Lieb-Thirring

But

Majorer les valeurs propres négatives $-e_1 \leq \ldots \leq -e_k \leq \ldots \leq 0$ de l'opérateur de Schrödinger $H = -\Delta + V$ avec $V \in L^{\gamma+d/2}(\mathbb{R}^d)$.

$$\sum_k e_k^\gamma \leq L_{d,\gamma} \int_{\mathbb{R}^d} V_-(x)^{\gamma+\frac{d}{2}}\, dx \tag{3}$$

$$\left(= \frac{1}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} [p^2 + V(x)]_-^\gamma \, dx dp \right)$$

Théorème

L'inégalité (3) est satisfaite avec $L_{d,\gamma} = 2^{-d} \pi^{-d/2} \Gamma(\gamma+1)/\Gamma(\gamma+1+d/2)$ pour γ vérifiant

$$\begin{array}{ll} \gamma \geq 1/2 & \text{si } d = 1 \\ \gamma > 0 & \text{si } d = 2 \\ \gamma \geq 0 & \text{si } d \geq 3 \end{array}$$

Interprétation

Cette inégalité est liée à des problèmes de stabilité de la matière.

Schéma de preuve

Réécriture du problème

Pour $\psi \in H^1$,

$$\begin{aligned}(-\Delta - V_-)\psi = -e\psi \Rightarrow (-\Delta + e)\psi = V_-\psi \Rightarrow \phi &= \sqrt{V_-}(-\Delta + e)^{-1}\sqrt{V_-}\phi \\ \Rightarrow \phi &= K_e\phi \\ \text{où } \phi &= \sqrt{V_-}\psi \text{ et } K_e = \sqrt{V_-}(-\Delta + e)^{-1}\sqrt{V_-}.\end{aligned}$$

Utilisation de KSS

- $K_e = C_e^* C_e$ où $C_e = (-\Delta + e)^{-1/2}\sqrt{V_-} = ((-i\nabla)^2 + e)^{-1/2}\sqrt{V_-(x)} \in \mathcal{J}_{d+2\gamma}$ puisque $(|p|^2 + e)^{-1/2}, \sqrt{V_-(x)} \in L^{d+2\gamma}$ (Inégalité de Kato-Seiler-Simon).
- $K_e > K_{e'}$ pour $e < e'$ donc $\mu_k(e) \geq \mu_k(e')$
- $N_e \leq B_e$ où N_e : nombre de valeurs propres de $-\Delta + V \leq -e$; B_e : nombre de valeurs propres de $K_e \geq 1$
- $B_e \leq \mathrm{tr}(K_e^m) = \mathrm{tr}(|C_e|^{2m}) \leq \|(|p|^2 + e)^{-1}\|_{L^m}^m \|V_-\|_{L^m}^m$ pour $m \geq 1$ (inégalité KSS)
- $\sum_{j\geq 0} |E_j|^\gamma = \sum_{j\geq 0} e_j^\gamma = \gamma \int_0^\infty e^{\gamma-1} N_e de$

Équilibre d'un gaz : cas classique

Gaz représenté par une mesure de probabilité $(2\pi\hbar)^{-d}\mu$ sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$; Énergie libre $H - TS$ où H est le hamiltonien du système, T la température, S son entropie.

$$\mathcal{E}_{cl,\hbar}(\mu) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{-d}} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} h(x,p)\mu(x,p) + T\mu(x,p)\log(\mu(x,p))dxdp$$

où $h(x,p)$ est le hamiltonien d'une particule, généralement $h(x,p) = p^2 + V(x)$.

Mesures de Gibbs

De la forme $C^{-1}e^{-h(x,p)}$, bonne candidate, préservation du flot hamiltonien

$$\dot{x} = \frac{\partial h}{\partial p},$$
$$\dot{p} = -\frac{\partial h}{\partial x}.$$

Quantité semi-classique

$(2\pi\hbar)^{-d}$: facteur semi-classique

Équilibre d'un gaz : cas quantique

Système représenté par un opérateur autoadjoint $\Gamma \geq 0$, $\mathrm{tr}(\Gamma) = 1$ ($\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$).

$$\mathcal{E}_{\boldsymbol{q},\hbar}(\Gamma) = \mathrm{tr}((-H + V)\Gamma) + T\,\mathrm{tr}(\Gamma \log \Gamma)$$

- H est le hamiltonien du système : opérateur autoadjoint ≥ 0, généralement $H = -\hbar^2 \Delta + V$ est l'opérateur de Schrödinger
- $\mathrm{tr}(\Gamma \log \Gamma)$ est l'entropie de Γ.

Théorèmes

Théorème : cas classique

Quand $\iint e^{-h(x,p)/T}dxdp < \infty$, $\mathcal{E}_{cl,\hbar}$ est minoré sur $\left\{ \mu \text{ mesure } \int \mu = (2\pi\hbar)^d \right\}$ et

$$\min_{(2\pi\hbar)^{-d}\int \mu = 1} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint h(x,p)\mu(x,p) + T\mu(x,p)\log(\mu(x,p))dxdp$$
$$= -T\log\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\iint e^{-h(x,p)/T}dxdp\right].$$

Atteint uniquement pour $\mu(x,p) = 1/[(2\pi\hbar)^d\mathcal{E}_0]e^{-h(x,p)/T}$ où $\mathcal{E}_0 = \iint e^{-h/T}$.

Théorème : cas quantique

Quand $\mathrm{tr}(e^{-H/T}) < \infty$, $\mathcal{E}_{q,\hbar}$ est minoré sur $\left\{ \Gamma \geq 0, \mathrm{tr}(\Gamma) = 1 \right\}$ et

$$\min_{\Gamma\geq 0, \mathrm{tr}\,\Gamma = 1} \mathrm{tr}(H\Gamma) + T\,\mathrm{tr}(\Gamma\log\Gamma) = -T\log\left[\mathrm{tr}(e^{-H/T})\right].$$

Atteint uniquement pour $\Gamma = e^{-H/T}/\mathrm{tr}(e^{-H/T})$.

Nota Bene

On prendra $T = 1$ pour la suite de la preuve.

Inégalité de Jensen

Soient (Ω, A, μ) un espace mesuré de masse totale $\nu(\Omega) = 1$; g une fonction ν-intégrable à valeur dans un intervalle $I \subset \mathbb{R}$; Φ une fonction convexe sur I dans $\mathbb{R}^3$. Alors

$$\Phi\left(\int_\Omega g d\nu\right) \leq \int_\Omega \Phi \circ g d\nu.$$

Si Φ est strictement convexe, il y a égalité si et seulement si g est constante μ-presque partout.

Ici $\Phi = x \mapsto x \log x$.

Cas classique

Jensen avec $\Omega = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, $\nu = 1/\mathcal{E}_0 e^{-h}$, $g = (2\pi\hbar)^{-d} \mu e^h$. On a l'unicité de μ.

Schémas de preuves

Cas quantique

Γ et e^{-H} sont compacts autoadjoints, ils admettent une diagonalisation.
$\Gamma = \sum_i \gamma_i \left|\phi_i\right\rangle \left\langle\phi_i\right|$, $H = -\log(e^{-H}) = \sum_i \lambda_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|$ (la seconde somme est formelle). On a

$$\mathcal{E}_q(\Gamma) = \sum_{i,j} \gamma_i \lambda_j a_{i,j} + \sum_i \gamma_i \log \gamma_i.$$

où $a_{i,j} = |(\phi_i, \psi_j)|^2$.

- Jensen avec $\Omega = \mathbb{N}^2$, $\nu = a_{i,j} e^{-\lambda_j} / \operatorname{tr}(e^{-H})$ et $g = \gamma_i e^{\lambda_j}$.
- Unicité de g mais pas directement de $\Gamma = e^{-H} / \operatorname{tr}(e^{-H})$, il faut travailler un peu plus.
- Autre méthode :

Théorème de Klein

Soit $n \in \mathbb{N}$ et $f_k, g_k : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continues bornées, $1 \leq k \leq n$, soient A, B des opérateurs compacts autoadjoints. Si pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^2$

$$0 \leq f(x, y) = \sum_{k=1}^{n} f_k(x) g_k(y),$$

alors

$$0 \leq \operatorname{tr} f(A, B).$$

Si de plus pour tout $x \neq y$ $f(x, y) > 0$ alors $\operatorname{tr} f(A, B) = 0$ si et seulement si $A = B$.

Interprétation semi-classique

- Passage du continu au discret.

Interprétation semi-classique

- Passage du continu au discret.
- Chaque volume $(2\pi\hbar)^{d}$ abrite un état quantique

Interprétation semi-classique

- Passage du continu au discret.
- Chaque volume $(2\pi\hbar)^d$ abrite un état quantique
- $$e^{-H} = \sum_i e^{-\lambda_i} \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|$$
- $$d\mu(x,p) = \exp(-h(x,p)) \frac{dxdp}{(2\pi\hbar)^d}$$

Interprétation semi-classique

- Passage du continu au discret.
- Chaque volume $(2\pi\hbar)^d$ abrite un état quantique
- $$e^{-H} = \sum_i e^{-\lambda_i} |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$$
- $$d\mu(x,p) = \exp(-h(x,p)) \frac{dxdp}{(2\pi\hbar)^d}$$
- On voudrait montrer

$$\mathrm{tr}(e^{\hbar^2\Delta - V(x)}) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint e^{-p^2 - V(x)} dxdp$$

Et par conséquent $\mathcal{E}^{min}_{cl,\hbar} \underset{\hbar\to 0}{\sim} \mathcal{E}^{min}_{q,\hbar}$, mais on a mieux :

$$|\mathcal{E}^{min}_{cl,\hbar} - \mathcal{E}^{min}_{q,\hbar}| \to 0 \text{ quand } \hbar \to 0.$$

Interprétation semi-classique

- Passage du continu au discret.
- Chaque volume $(2\pi\hbar)^d$ abrite un état quantique
- $$e^{-H} = \sum_i e^{-\lambda_i} |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$$
- $$d\mu(x,p) = \exp(-h(x,p)) \frac{dxdp}{(2\pi\hbar)^d}$$

Pour $H = -\Delta + V$ et $h(x,p) = p^2 + V(x)$.

Théorème

On a
$$|\mathcal{E}^{min}_{cl,\hbar} - \mathcal{E}^{min}_{q,\hbar}| \to 0 \text{ quand } \hbar \to 0,$$
et comme ces deux quantités tendent vers $-\infty$, on a aussi
$$\mathcal{E}^{min}_{cl,\hbar} \sim \mathcal{E}^{min}_{q,\hbar} \text{ quand } \hbar \to 0.$$

C'est-à-dire
$$\lim_{\hbar\to 0} \hbar^d \operatorname{tr}(e^{\hbar^2\Delta - V(x)}) = (2\pi)^{-d} \iint e^{-p^2 - V(x)} dxdp.$$

Schéma de preuve : limite semi-classique

Formule de Trotter

Si $-A, -B$ sont des opérateurs autoadjoints bornés inférieurement tels que $A+B$ soit autoadjoint alors

$$\lim\,(e^{A/n}e^{B/n})^n = e^{A+B} \text{ fortement.}$$

Dans le cas où $V \geq c$, on prend $A = H$, $B = V$, alors

$$\begin{aligned} |\operatorname{tr}((e^{A/n}e^{B/n})^n)| &\leq \operatorname{tr}(|e^{A/n}e^{B/n}|^n) = \|\ e^{-\hbar^2 p^2/n}e^{-V(x)/n}\|_n^n \\ &\underset{KSS}{\leq} \frac{1}{(2\pi)^d}\int (e^{-\hbar^2p^2/n})^n dp \int (e^{-V(x)/n})^n dx \\ \operatorname{tr}(e^{\hbar^2\Delta - V}) &\underset{Fatou}{\leq} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\iint e^{-p^2-V(x)}dxdp. \end{aligned}$$

Nota Bene

On peut montrer que $\operatorname{tr}(e^{\hbar^2\Delta - V}) \leq \operatorname{tr}(e^{\hbar^2\Delta}e^{-V})$ (Golden-Thompson).
On rappelle que $[X, P] = -i\hbar\,\mathrm{Id}_{L^2}$ et $\hbar \ll 1$.

Schéma de preuve (suite) : limite semi-classique

États cohérents

$$f_{x,p}(y) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{d/4}}\, e^{-(x-y)^2/2\hbar} e^{ip\cdot y/\hbar}\ , \text{ lien entre } \mathbb{R}^{2d} \to L^2(\mathbb{R}^d)$$

représente un état quantique

Résolution de l'identité

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |f_{x,p}\rangle \langle f_{x,p}|\, dxdp = \mathrm{Id}_{L^2}$$

$$(2\pi\hbar)^d \operatorname{tr}(e^{-H}) = \iint dxdp\, \langle f_{x,p}|\, e^{-H}\, |f_{x,p}\rangle \underset{Jensen}{\geq} \iint dxdp\, e^{-\langle f_{x,p}|H|f_{x,p}\rangle}$$

$$(2\pi\hbar)^d \operatorname{tr}(e^{\hbar^2\Delta - V}) \geq \left(\int e^{-p^2} dp\right)\left(\int \exp(-V \star |f_{x,p}|^2(x))dx\right) e^{-d\hbar/2}$$

$$\liminf (2\pi\hbar)^d \operatorname{tr}(e^{-H}) \underset{Fatou}{\geq} \iint e^{-p^2 - V(x)}\, dxdp$$

Morale

Première quantification

$$\begin{aligned} \text{fonctions sur } \mathbb{R}^{2d} &\longrightarrow \text{ opérateurs autoadjoints sur } L^2(\mathbb{R}^d) \\ x_j &\longmapsto X_j \\ p_j &\longmapsto P_j = -i\hbar\partial x_j \end{aligned}$$

avec $[X_j, P_j] = -i\hbar\,\mathrm{Id} \to 0$ quand $\hbar \to 0$

Régime semi-classique

Quantité quantique $(\hbar) \underset{\hbar\to 0}{\sim}$ Quantité classique

Question ?

D'autres problèmes sont-ils décrits par le même formalisme ?

Ensemble grand-canonique et seconde quantification

Ensemble grand-canonique – modèle μVT

- Gaz avec nombre de particules variable
- Potentiel d'interaction entre particules w
- domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$
- Énergie de Hartree pour une particule
  $\mathcal{E}_H(u) = \int_\Omega |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dxdy$
- $d\mu(u) = Z^{-1} e^{-\mathcal{E}(u)} du$

Espace de Fock

(particules bosoniques)

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \bigotimes_{s}^{n} \mathcal{H} = \mathbb{C} \oplus \mathcal{H} \oplus (\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}) \oplus \dots$$

Ensemble grand-canonique et seconde quantification

Seconde quantification

$$\text{observables sur } \mathcal{H} \longrightarrow \text{ observables sur } \mathcal{F}(\mathcal{H})$$
$$h \longmapsto \mathbb{H}_0 = 0 \oplus \bigoplus_{n\geq 1} \left(\sum_{j=1}^{n} h_j \right)$$
$$\text{observables sur } \mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H} \longrightarrow \text{ observables sur } \mathcal{F}(\mathcal{H})$$
$$w \longmapsto \mathbb{W} = 0 \oplus 0 \oplus \bigoplus_{n\geq 2} \left(\sum_{1\leq i<j\leq n} w_{ij} \right)$$

Hamiltonien global

$$\mathbb{H}_\lambda = \mathbb{H}_0 + \lambda \mathbb{W}$$

Cas de la dimension finie

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$

Énergie de Hartree

$\mathcal{E}_H(u) = \langle u, hu \rangle + \frac{1}{2} \langle u \otimes_s u, w\, u \otimes_s u \rangle$ où h est un opérateur autoadjoint sur $\mathcal{H}$ et w un opérateur autoadjoint sur $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$.
$h = \sum_i \lambda_i \left| e_i \right\rangle \left\langle e_i \right|$; $w = \sum_{i,j,k,l} \langle e_i \otimes_s e_j, w\, e_k \otimes_s e_l \rangle \left| e_i \otimes_s e_j \right\rangle \left\langle e_j \otimes_s e_k \right|$

Opérateurs de création et d'annihilation

Pour $f \in \mathcal{H}$:

$$a^\dagger(f)\big(\psi_0 \oplus \psi_1 \oplus \ldots\big) = 0 \oplus (\psi_0 f) \oplus (f \otimes_s \psi_1) \oplus \ldots$$

$$a(f)\big(g_1 \otimes_s \ldots \otimes_s g_n\big) = \langle f, g_1 \rangle g_2 \otimes_s \ldots \otimes_s g_n + \ldots + \langle f, g_n \rangle g_1 \otimes \ldots \otimes g_{n-1}.$$

En posant $a_i = a(e_i)$, on a

$$\mathbb{H}_0 = \sum_{i=1}^d \lambda_i a_i^* a_i \;; \mathbb{W} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} w_{i,j} a_i^* a_j^* a_k a_l$$

En posant $b := a/\sqrt{T}$ et $b^\dagger := a^\dagger/\sqrt{T}$ ($[b, b^\dagger] = 1/T$) on obtient

$$\frac{\mathbb{H}_\lambda}{T} = \sum_{i=1}^d \lambda_i b_i^* b_i + \frac{\lambda T}{2} \sum_{i,j,k,l} w_{i,j} b_i^* b_j^* b_k b_l$$

d'où le choix $\lambda = 1/T$.

Régime semi-classique dans l'espace de Fock

$\Gamma_T = \exp(-\frac{\mathbb{H}_{1/T}}{T}) / \operatorname{tr}(\exp(-\frac{\mathbb{H}_{1/T}}{T})$ est l'unique minimiseur du problème

$$\inf_{\Gamma \geq 0, \operatorname{tr}\Gamma = 1} \left\{ \operatorname{tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}_{1/T}\Gamma) + T \operatorname{tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma \log \Gamma) \right\}$$

$$\left(= -T \; \log(\operatorname{tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} \left(\exp(-\frac{\mathbb{H}_{1/T}}{T}) \right)) \right)$$

Équivalence de l'énergie

Et on a, comme lors de la première quantification :

$$\operatorname{tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} \left(\exp(-\frac{\mathbb{H}_{1/T}}{T}) \right) \sim \left(\frac{T}{\pi} \right)^{\dim \mathcal{H}} \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}_H(u)) du.$$

Preuve

Généralisation des méthodes utilisées pour la résolution du premier problème (première quantification), notamment en généralisant la notion d'états cohérents.

Conclusion

Mécanique quantique

- Quantification
- Deux opérateurs qui ne commutent pas $[X, P] = -i\hbar\,\mathrm{Id}$ ou $[a^\dagger, a] = \mathrm{Id}$
- Formalisme commun (opérateurs autoadjoints, états cohérents, paramètre de défaut de commutation, ...)

Régime semi-classique

Équivalence à la limite $\hbar \to 0$ ou $T \to \infty$, inégalités entre deux mondes : avant quantification / après quantification