Théorèmes de de Finetti, limites de champ moyen et condensation de Bose-Einstein

Nicolas Rougerie

▶ **To cite this version:**

Nicolas Rougerie. Théorèmes de de Finetti, limites de champ moyen et condensation de Bose-Einstein. 2014. hal-01060125v1

HAL Id: hal-01060125

https://hal.science/hal-01060125v1

Preprint submitted on 3 Sep 2014 (v1), last revised 13 Feb 2015 (v4)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÉORÈMES DE DE FINETTI, LIMITES DE CHAMP MOYEN ET CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN

NICOLAS ROUGERIE
Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés, Université Grenoble 1 & CNRS.

Cours Peccot au collège de France, Février-Mars 2014.

Résumé. Ces notes de cours traitent de l'approximation de champ moyen pour les états d'équilibre de systèmes à N corps en mécanique statistique classique et quantique. Une stratégie générale pour la justification des modèles effectifs basés sur des hypothèses d'indépendance statistique des particules est présentée en détail. Les outils principaux sont des théorèmes de structure à la de Finetti qui décrivent les limites pour N grand des états admissibles aux sytèmes en question, en exploitant l'indiscernabilité des particules. L'accent est mis sur les aspects quantiques, notamment l'approximation de champ moyen pour le fondamental d'un grand système bosonique, en lien avec le phénomène de condensation de Bose-Einstein: structure des matrices de densité réduites d'un grand système bosonique, méthodes de localisation dans l'espace de Fock, dérivation de fonctionnelles d'énergie effectives de type Hartree ou Schrödinger non linéaire.

Sommaire

Avant-propos 3
Un mot sur les expériences 3
Quelques questions mathématiques posées par les expériences 4
Plan du cours 6
Remerciements 7
1. **Introduction: Formalisme et Position des Problèmes** 8
1.1. Formalisme de la mécanique statistique et approximation de champ moyen 8
1.2. Formalisme de la mécanique quantique et condensation de Bose-Einstein 12
1.3. Champ moyen et théorème de de Finetti classique 19
1.4. Champ moyen et théorème de de Finetti quantique 22
2. **Mécanique statistique à l'équilibre** 27
2.1. Théorème de Hewitt-Savage 27
2.2. Théorème de Diaconis-Freedman 30
2.3. Limite de champ moyen pour une énergie libre classique 34
2.4. Estimations quantitatives dans la limite champ moyen/température faible 37
3. **Théorème de de Finetti quantique et théorie de Hartree** 41
3.1. Systèmes confinés et Théorème de de Finetti fort 43
3.2. Systèmes sans états liés et Théorème de de Finetti faible 46
3.3. Relation entre les différents résultats de structure pour les états bosoniques 52

Date: Février-Mars 2014, cours Peccot, Collège de France.

4. **Théorème de de Finetti quantique en dimension finie** 57
4.1. La construction de CKMR et la formule de Chiribella 58
4.2. Heuristiques et motivations 60
4.3. La formule de Chiribella et la quantification d'anti-Wick 61
5. **Localisation dans l'espace de Fock et applications** 64
5.1. Convergence faible et localisation pour un état à deux corps 64
5.2. Localisation dans l'espace de Fock 66
5.3. Preuve du théorème de de Finetti faible et corollaires 69
6. **Dérivation de la théorie de Hartree: cas général** 74
6.1. Le problème invariant par translation 76
6.2. Conclusion de la preuve dans le cas général 80
7. **Dérivation de fonctionnelles de type Gross-Pitaevskii** 84
7.1. Remarques préliminaires 84
7.2. Enoncés et discussion 87
7.3. Estimations quantitatives pour la théorie de Hartree 91
7.4. De Hartree à NLS 97
Appendice A. **Usage Quantique du Théorème Classique** 100
A.1. Formulation classique du problème quantique 101
A.2. Passage à la limite 103
A.3. Le problème limite 105
A.4. Conclusion 107
Appendice B. **Bosons en dimension finie à grande température** 108
B.1. Cadre et résultat 108
B.2. Inégalités de Berezin-Lieb 110
B.3. Preuve du Théorème B.1 112
Références 113

Avant-propos

Le but de ces notes de cours est de présenter de manière aussi exhaustive et pédagogique que possible un ensemble de résultats mathématiques récents ayant trait au phénomène physique de *condensation de Bose-Einstein* dans des gaz d'atomes ultra-froids. Un des nombreux problèmes théoriques posés par ces expériences consiste en la compréhension du lien entre les modèles effectifs, décrivant les expériences avec une précision remarquable, et les principes de base de la mécanique quantique. Le processus liant les descriptions fondamentales et effectives est souvent appellé une *limite de champ moyen* et la théorie de ces limites a motivé un très grand nombre de travaux en physique théorique et mathématique. Dans ce cours on se focalisera sur une des méthodes permettant de traiter la limite de champ moyen, basée sur les *théorèmes à la de Finetti*. On interprétera l'émergence des modèles de champ moyen comme une conséquence fondamentale de la structure des états physiques en considération.

Ce texte a pour vocation d'embrasser des aspects d'analyse, de probabilité, de physique de la matière condensée, de physique des atomes froids, de mécanique statistique et quantique, d'information quantique. L'emphase sera mise sur la spécialité de l'auteur, à savoir les aspects analytiques de la dérivation des modèles de champ moyen, dans le cas de modèles statiques. La présentation aura donc un aspect beaucoup plus mathématique que physique, mais le lecteur devrait garder à l'esprit le lien entre les questions soulevées ici (et dans la littérature citée) et la physique des atomes froids, en particulier les expériences ayant permis l'observation de condensats de Bose-Einstein en laboratoire depuis le milieu des années 90.

Un mot sur les expériences. Le phénomène de condensation de Bose-Einstein est au centre d'un vaste de champ de recherche en pleine expansion depuis le milieu des années 90. L'extrême versatilité des conditions maintenant accessibles à l'expérience est une source fascinante de réponses à des questions fondamentales de physique. Le lecteur est renvoyé aux textes [1, 15, 40, 42, 107, 128, 133, 65, 38] et leurs bibliographies pour de plus amples développements sur la physique des atomes froids. Des présentations très accessibles au non-spécialiste sont données dans [41, 30, 35].

Les premières observations du phénomène de condensation de Bose-Einstein ont eu lieu simultanément au MIT et à Boulder, Colorado dans les groupes de W. Ketterle d'une part et E. Cornell et C. Wieman d'autre part, ce qui leur a valu le prix Nobel de physique 2001. Les possibilités ouvertes par ces expériences et celles qui ont suivi en termes d'exploration de la physique quantique macroscopique en font une des pierres angulaires de la physique contemporaine.

On entend par "condensat de Bose-Einstein" un objet constitué par un grand nombres de particules (habituellement des atomes alcalins) dans le même état quantique. La condensation nécessite donc en premier lieu que les particules en considération soient des bosons, c'est-à-dire ne satisfassent pas le principe de Pauli qui interdit à deux particules d'occuper le même état quantique.

Cette occupation macroscopique d'un unique état quantique de plus basse énergie ne se manifeste qu' à très faible température. Concrètement, il existe une température critique T_c pour l'existence d'un condensat, et l'occupation macroscopique de l'état de plus basse énergie n'apparaît que pour des températures $T < T_c$. L'existence théorique de cette

température critique remonte aux travaux de Bose et Einstein dans les années 20 [16, 56] mais des objections de taille ont été formulées à l'époque:

(1) La température critique T_c est extrêmement basse, complètement inatteignable avec les moyens des années 20.
(2) A une telle température, l'état fondamental de tous les composés connus est un solide, et non pas un gaz, comme supposé dans la théorie de Bose-Einstein.

La première objection n'a pu être levée que dans les années 90 avec l'apparition des puissantes techniques de refroidissement par laser[1] et par évaporation, qui ont permis d'atteindre des températures de l'ordre du micro-Kelvin dans des gaz quantiques piégés par des dispositifs magnéto-optiques. Quant à la seconde, la solution est dans la dilution des échantillons en question: les rencontres de plus trois particules ou plus nécessaires pour entamer la formation de molécules puis d'un solide sont extrêmement rares. On pourra donc observer une phase gazeuse méta-stable pendant un temps suffisant pour la formation d'un condensat.

De nombreuses observations concordantes ont confirmé la création de condensats de Bose-Einstein: imagerie de la répartition en vitesse/énergie des atomes piégés, interférences de condensats, confirmation du caractère superfluide des objets créés ... L'importance nouvelle ainsi acquise par les modèles mathématiques utilisés pour la description de ce phénomène a motivé une vaste litérature consacrée à leur analyse.

Quelques questions mathématiques posées par les expériences. En admettant l'existence de la condensation, le gaz en question peut-être décrit par une seule fonction d'onde $\psi : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{C}$, correspondant à l'état quantique commun à toutes les particules. Une assemblée de N particules quantiques est normalement décrite par une fonction d'onde à N particules $\Psi_N : \mathbb{R}^{dN} \mapsto \mathbb{C}$, et il faut donc comprendre pourquoi et comment on peut passer d'une fonction de N variables Ψ_N à une fonction d'une seule variable décrivant un comportement collectif. L'étude de la précision de cette approximation, qui a des conséquences pratiques et théoriques très importantes, est une tâche de première importance pour le théoricien et le mathématicien.

On peut se poser les questions suivantes:

(1) Peut-on décrire l'état fondamental (à température nulle) d'un système de bosons en interaction par une seule fonction d'onde ψ ? En présence d'interactions, cette question est hautement non triviale.
(2) Partant d'une description à une fonction d'onde et suivant la dynamique naturelle pour un système de N particules quantiques (flot de Schrödinger N corps), la description par une seule fonction d'onde est-elle préservée par la dynamique ?
(3) Peut-on prouver rigoureusement l'existence d'une température critique T_c en dessous de laquelle la description à une fonction d'onde est valable pour les états d'équilibre à température T du système ?

Il faut entendre ici, dans l'esprit de la physique statistique, que nous voulons établir la validité de l'approximation par une seule fonction d'onde *asymptotiquement dans la limite d'un grand nombre de particules*, modulo des hypothèses appropriées sur le modèle en question. Idéalement, les hypothèses devraient se réduire à celles garantissant que le modèle à N corps de départ ainsi que le modèle à un corps d'arrivée soient bien définis

[1] Qui ont valu le prix Nobel de Physique 1997 à Steven Chu, William Phillips et Claude Cohen-Tannoudji.

mathématiquement. Remarquons que pour des particules quantiques en interaction, le modèle de départ est toujours linéaire alors que le modèle d'arrivée est toujours non-linéaire.

Beaucoup des résultats récents présentés ci-après sont le pendant naturel dans un cadre quantique de résultats de mécanique classique plus anciens et mieux connus, pour lesquels des question reliées se posent. Pour des raisons pédagogiques, quelques notions sur les limites de champ moyen pour des modèles de mécanique classique seront donc rappellées par la suite.

La question 1 est l'objet de ce cours, et nous verrons qu'elle nous amènera à développer des outils d'intérêt mathématique intrinsèque. On peut l'attaquer par essentiellement deux approches:

- La première exploite des propriétés particulières de certains modèles physiques importants. Elle s'applique ainsi au cas par cas, avec des ingrédients différents et sous des hypothèses souvent restrictives, en particulier sur la forme des interactions. Sans prétendre à l'exhaustivité, on pourra consulter [145, 146, 141, 142, 151] et [12, 115, 148, 75, 150, 107, 105] pour des applications de cette approche à des systèmes respectivement classiques et quantiques.
- La seconde, qui est l'objet de ce cours, exploite les propriétés de l'ensemble des états accessibles, c'est-à-dire des fonctions à N corps Ψ_N admissibles pour la description d'un système réel. Cette approche a le mérite d'être beaucoup plus générale que la première et dans beaucoup de cas de se rapprocher de bien plus près des "hypothèses idéalement minimales" pour l'étude de la limite de champ moyen.

  Une interprétation possible est de voir la limite de champ moyen comme un régime où les corrélations entre les particules deviennent négligeables. La notion clé sera celle de symétrie bosonique, dont on tâchera d'exploiter à fond les conséquences. Nous aurons l'occasion de discuter la littérature plus en détail ultérieurement, mais citons tout de suite [125, 25, 84, 85, 87, 144] et [63, 64, 129, 134, 96, 97] pour des applications de ces idées en mécanique classique et quantique respectivement.

La distinction entre les deux approches est bien sûr un peu artificielle: on a souvent avantage à utiliser des idées empruntées aux deux philosophies.

Pour garder à ces notes une longueur raisonnable, la question 2 ci-dessus n'y est pas du tout traitée bien qu'une vaste littérature mathématique existe, voir par exemple [80, 71, 161, 9, 57, 58, 4, 62, 69, 139, 90, 132] et références citées, ainsi que le cours [73]. Notons que les théorèmes de type "de Finetti quantique" qui vont nous occuper ici se sont également récemment révélés des outils très utiles dans l'analyse de la question 2, voir [4, 5, 6, 29, 28]. L'usage des théorèmes de de Finetti classiques dans un cadre dynamique est plus ancienne [161, 162, 163].

Quant à la question 3, il s'agit d'un problème ouvert fameux de physique mathématique sur lequel bien peu de choses sont connues à un niveau de rigueur satisfaisant, voir cependant [149, 14]. Nous n'effleurerons les questions soulevées par la prise en compte de la température dans un système de bosons en interaction qu'à l'Appendice B, et dans un cadre grandement simplifié. Ce sujet sera plus amplement développé dans l'article en préparation [98].

Plan du cours.

Ces notes sont organisées comme suit:

- Une longue introduction, Chapitre 1, rappelle les éléments de formalisme dont nous aurons besoin pour formuler précisément les problèmes qui nous intéresseront. On commencera par le formalisme de la mécanique statistique classique et poursuivra avec celui de la mécanique quantique[2].

  La question de la justification de l'approximation de champ moyen pour les états d'équilibre d'un Hamiltonien donné est également formulée dans les deux contextes. La stratégie de preuve qui forme le coeur du cours est décrite de manière complètement formelle, pour introduire le plus rapidement possible les théorèmes de de Finetti qui sont les outils principaux de la stratégie. Le parallèle entre le cadre classique et le cadre quantique est très fort, les différences apparaissant essentiellement lorsqu'il s'agit de démontrer ces théorèmes fondamentaux dans les cadres classiques et quantiques.
- Le Chapitre 2, essentiellement indépendant de la suite des notes, contient le traitement des sytèmes classiques : preuve du théorèmes de de Finetti classique (également appelé théorème de Hewitt-Savage), application aux états d'équilibre d'un Hamiltonien classique. La preuve que nous donnerons du théorème de Hewitt-Savage, due à Diaconis et Freedman est purement classique et ne se généralise pas au cas quantique.
- On attaque le problème quantique au Chapitre 3: deux versions (forte et faible) du théorème de de Finetti quantique sont présentées sans preuve, avec leurs applications directes à des exemples "relativement simples" de systèmes bosoniques dans le régime de champ moyen. La Section 3.3 discute les connexions entre les différentes versions du théorème de de Finetti quantique et décrit la stratégie générale que nous suivrons pour leur preuve dans la suite du cours.
- Les Chapitres 4 et 5 contiennent les deux principales étapes de la preuve du théorème de de Finetti quantique que nous avons choisi de présenter: respectivement "constructions et estimations explicites en dimension finie" et "passage à la dimension infinie par localisation dans l'espace de Fock". La preuve ne devrait pas être vue comme une boîte noire: non seulement le résultat final mais aussi les constructions intermédiaires seront réutilisés dans la suite.
- Armés des résultats des deux chapitres précédents, on pourra donner au Chapitre 6 la justification de l'approximation de champ moyen pour le fondamental d'un système bosonique essentiellement générique. Contrairement aux cas traités au Chapitre 3, le théorème de de Finetti en lui-même ne suffira pas pour ce cas, et il faudra ré-invoquer certains des ingrédients du Chapire 5.
- La limite de champ moyen n'est pas la seule ayant un intérêt physique. On étudiera au Chapitre 7 un régime où la portée des interactions tend vers 0 quand $N \to \infty$ (gaz dilué). Dans ce cas on obtient à la limite des fonctionnelles d'énergie de type

[2]Les deux formalismes peuvent s'unifier avec le vocabulaire des algèbres C^*: en mécanique classique les observables du système forment une algèbre C^* commutative, en mécanique quantique une algèbre C^* non-commutative. Ce point de vue unifié est laissé de côté dans ces notes. Le fameux théorème de Gelfand-Naimark-Segal montre que la formulation plus générale des deux théories se réduit essentiellement à celle que nous avons choisi de présenter.

NLS, avec non-linéarités locales. Nous présentons une stratégie pour la dérivation de ces objets à partir du problème à N corps basée sur les outils du Chapitre 4.

Le corps du texte est complété par deux appendices contenant deux notes non publiées dues à Mathieu Lewin et à l'auteur.

- L'Appendice A montre comment, dans certains cas particuliers, on peut utiliser le théorème de de Finetti classique pour traiter un problème quantique. Cette stratégie est moins naturelle (et moins performante) que celle présentée aux Chapitres 3 et 6 mais présente un intérêt conceptuel.
- L'Appendice B dévie du cadre traité dans le reste du cours puisque les espaces de Hilbert y seront de dimension finie. On peut obtenir dans ce contexte un théorème de nature semi-classique qui donne des exemples de mesures de de Finetti non rencontrées précédemment en considérant une limite de grande température combinée avec une limite de champ moyen. Ce sera l'occasion d'évoquer les inégalités de Berezin-Lieb et leur lien avec les considérations du Chapitre 4.

Remerciements. La motivation pour écrire ces notes est venue de l'opportunité qui m'a été donnée de présenter ces sujets de manière extensive dans le cadre du cours Peccot du Collège de France[3]. Je tiens à remercier le public de ces cours pour son intérêt et ses remarques constructives. Ce cours doit bien entendu beaucoup à mes collaborateurs sur les sujets traités: Mathieu Lewin et Phan Thanh Nam pour les aspects quantiques, Sylvia Serfaty et Jakob Yngvason pour les aspects classiques. Des échanges avec plusieurs collègues, en particulier Zied Ammari, Patrick Gérard, Isaac Kim, Jan-Philip Solovej, Jürg Fröhlich, Elliott Lieb et Eric Carlen, ont également été très utiles. Le support financier de l'ANR (Projet Mathosaq ANR-13-JS01-0005-01) est également à mentionner.

[3]On pourra trouver les vidéos du cours sur le site du Collège de France

1. Introduction: Formalisme et Position des Problèmes

Nous passons maintenant à la description des mathématiques qui vont nous occuper dans le reste du cours. L'objet principal de notre intérêt est la mécanique quantique N corps, mais les analogies avec certaines questions de mécanique statistique classique est assez frappante pour que nous décrivions également ce formalisme. Les questions d'unité et de dimension des quantités sont ignorées systèmatiquement pour alléger les notations.

1.1. Formalisme de la mécanique statistique et approximation de champ moyen.

Pour des raisons pédagogiques, nous rappellerons quelques notions sur les limites de champ moyen en mécanique classique avant d'aborder les aspects quantiques, liés à la condensation de Bose-Einstein. Ce paragraphe a pour but de fixer les notations et rappeller quelques concepts de base sur la mécanique statistique classique. On se limitera à la description des états d'équilibre d'un système classique, les aspects dynamiques étant volontairement ignorés (on pourra à ce propos consulter par exemple [73]).

Espace des phases. L'état d'une particule classique est entièrement déterminé par la donnée de sa position x et de sa vitesse v (ou de manière équivalente son moment, p). Pour une particule vivant dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ on travaille donc dans l'espace des phases $\Omega \times \mathbb{R}^d$, ensemble des positions et vitesses possibles. Pour un système comprenant N particules on travaillera dans $\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN}$.

Etats purs. On appelle état pur l'état d'un système où les positions et moments de toutes les particules sont connus avec certitude. Les états d'équilibre à température nulle sont par exemple des états purs: en mécanique statistique classique, l'incertitude sur l'état d'équilibre d'un système n'est dû qu'au "bruit thermique". Pour un système de N particules, un état pur correspond à un point $(X;P) = (x_1, \dots, x_N; p_1, \dots, p_N) \in \Omega^N \times \mathbb{R}^{dN}$ de l'espace des phases, où le couple $(x_i; p_i)$ donne la position et le moment de la particule i. Dans la perspective de l'introduction des états mixtes au paragraphe suivant, on identifiera un état pur avec une combinaison de masses de Dirac:

$$\mu_{X;P} = \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \delta_{X_\sigma; P_\sigma}. \tag{1.1}$$

L'équation précédente tient compte du fait que les particules sont en réalité *indiscernables*, et qu'on ne peut donc stricto sensu pas attribuer le couple (x_i, p_i) de position/moment à une des N particules en particulier. D'où la somme dans (1.1) sur le groupe des permutations de N éléments Σ_N. La notation adoptée est

$$\begin{aligned} X_\sigma &= (x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \\ P_\sigma &= (p_{\sigma(1)}, \dots, p_{\sigma(N)}) \end{aligned} \tag{1.2}$$

et dire que le système est dans l'état $\mu_{X;P}$ signifie que une des particules a la position $(x_i, p_i), i = 1 \dots N$, sans qu'on puisse préciser laquelle en raison de l'indiscernabilité.

Etats mixtes. En présence d'une température non nulle, c'est-à-dire d'un certain bruit thermique, on ne peut déterminer avec certitude l'état du sytème. On cherche en fait une superposition statistique d'états purs, correspondant à spécifier la probabilité que le système soit dans un certain état pur. On parle alors d'états mixtes, qui sont les

combinaisons convexes d'états purs vus comme des masses de Dirac comme en (1.1). L'ensemble des combinaisons convexes d'états purs correspond bien sûr à l'ensemble des mesures de probabilité symétriques sur l'espace des phases. Un état mixte général pour N particules est donc une mesure de probabilité $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN})$ satisfaisant

$$d\boldsymbol{\mu}_N(X;P) = d\boldsymbol{\mu}_N(X_\sigma;P_\sigma) \tag{1.3}$$

pour toute permutation $\sigma \in \Sigma_N$. On interprète $\boldsymbol{\mu}_N(X;P)$ comme la densité de probabilité que la particules i ait la position x_i et le moment p_i. Les états purs (1.1) sont bien sûr des états mixtes particuliers où l'incertitude statistique se réduit à zéro (à l'indiscernabilité près).

Energie libre. On spécifie l'énergie d'un système classique en se donnant un Hamiltonien, une fonction sur l'espace des phases. En mécanique non relativiste, l'énergie cinétique d'une particule de moment p est toujours $m|p|^2/2$, et en prenant $m = 1$ pour simplifier les notations on considérera une énergie de forme

$$H_N(X;P) := \sum_{j=1}^N \frac{|p_j|^2}{2} + \sum_{j=1}^N V(x_j) + \lambda \sum_{1\le i<j\le N} w(x_i - x_j) \tag{1.4}$$

où V représente un potentiel extérieur (par exemple électrostatique) où les particules sont plongées et w un potentiel d'interaction de paire que l'on supposera symétrique

$$w(-x) = w(x).$$

Le paramètre réel λ donne la force des interactions entre particules. On pourrait bien sûr ajouter des interactions à trois corps, quatre corps, etc ... mais il est rare que la modélisation le nécessite, et lorsque c'est le cas il n'y a pas de difficulté conceptuelle supplémentaire.

L'énergie d'un état mixte $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN})$ est alors donnée par

$$\mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}_N] := \int_{\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN}} H_N(X;P) d\boldsymbol{\mu}_N(X;P) \tag{1.5}$$

ce qui se réduit par symétrie du Hamiltonien à $H_N(X;P)$ pour un état pur de la forme (1.1). A température nulle, les états d'équilibre du système sont donnés par la minimisation de la fonctionnelle d'énergie (1.5):

$$E(N) = \inf \left\{ \mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}_N], \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN}) \right\} \tag{1.6}$$

et l'infimum (l'énergie fondamentale) est bien sûr égal au minimum du Hamiltonien H_N et atteint par un état pur de la forme (1.1) où $(X;P)$ est un point de minimum de H_N (en particulier $P = (0,\dots,0)$).

En présence d'agitation thermique, il convient de prendre en compte l'entropie

$$S[\boldsymbol{\mu}_N] := -\int_{\Omega^N \times \mathbb{R}^{dN}} d\boldsymbol{\mu}_N(X;P) \log(\boldsymbol{\mu}_N(X;P)) \tag{1.7}$$

qui est une mesure du degré d'incertitude sur l'état du système. Notons par exemple que les états purs ont l'entropie la plus basse possible, $S[\boldsymbol{\mu}_N] = -\infty$ si $\boldsymbol{\mu}_N$ est de la

forme (1.1). A température T, l'état du système est donné par la minimisation de la fonctionnelle d'énergie libre

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[\boldsymbol{\mu}_N] &= \mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}_N] - TS[\boldsymbol{\mu}_N] \\ &= \int_{\Omega^N\times\mathbb{R}^{dN}} H_N(X;P)d\boldsymbol{\mu}_N(X;P) + T\int_{\Omega^N\times\mathbb{R}^{dN}} d\boldsymbol{\mu}_N(X;P)\log(\boldsymbol{\mu}_N(X;P)) \quad (1.8)\end{aligned}$$

ce qui revient à dire que les états les plus probables pour le système doivent trouver un équilibre entre avoir une faible énergie et une forte entropie, c'est-à-dire un fort désordre. On notera

$$F(N) = \inf\left\{\mathcal{F}[\boldsymbol{\mu}_N], \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N\times\mathbb{R}^{dN})\right\} \quad (1.9)$$

sans spécifier la dépendance en température. Un minimiseur se doit alors d'être une mesure de probabilité relativement régulière de manière à ce que (moins) l'entropie soit finie.

Minimisation en vitesse. En l'absence d'une relation imposée entre la distibution en position et en moment d'un état classique, la minimisation des fonctionnelles précédentes vis à vis des variables de vitesse est en fait triviale. Un état minimisant (1.5) est toujours de la forme

$$\boldsymbol{\mu}_N = \delta_{P=0}\otimes\sum_{\sigma\in\Sigma_N}\delta_{X=X^0_\sigma}$$

où X^0 est un point de minimum de $H_N(X;0,\dots,0)$, i.e. les particules sont toutes immobiles. Il s'agit donc de chercher les points de minimum en X de $H_N(X;0,\dots,0)$.

La minimisation de (1.8) donne lieu à une gaussienne en vitesse multipliée par un état de Gibbs en les variables de position seules[4]

$$\boldsymbol{\mu}_N = \frac{1}{Z_P}\exp\left(-\frac{1}{2T}\sum_{j=1}^N|p_j|^2\right)\otimes\frac{1}{Z_N}\exp\left(-\frac{1}{T}H_N(X;0,\dots,0)\right).$$

Les variables de vitesse n'interviennent donc plus dans la minimisation des fonctionnelles donnant les états d'équilibre et on les ignorera totalement dans la suite de ce cours. On continuera à utiliser les notations ci-dessus pour la minimisation en position:

$$\begin{aligned}H_N(X) &= \sum_{j=1}^N V(x_j) + \lambda\sum_{1\le i<j\le N} w(x_i-x_j) \\ \mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}_N] &= \int_{\Omega^N} H_N(X)d\boldsymbol{\mu}_N(X) \\ \mathcal{F}[\boldsymbol{\mu}_N] &= \int_{\Omega^N} H_N(X)d\boldsymbol{\mu}_N(X) + T\int_{\Omega^N} d\boldsymbol{\mu}_N(X)\log(\boldsymbol{\mu}_N(X)) \quad (1.10)\end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\mu}_N\in\mathcal{P}_s(\Omega^N)$ est une probabilité symétrique des variables de position seulement.

[4]Les *fonctions de partition* Z_P *et* Z_N *normalisent l'état dans* L^1.

Marginales, densités réduites. Etant donné un état mixte à N particules, il est très utile de considérer ses marginales, ou densités réduites, obtenues en intégrant certaines variables:

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}(x_1,\dots,x_n) = \int_{\Omega^{N-n}} \boldsymbol{\mu}(x_1,\dots,x_n,x'_{n+1},\dots,x'_N)dx'_{n+1}\dots dx'_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^n). \quad (1.11)$$

La $n-$ème densité réduite $\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}$ s'interprète comme la densité de probabilité d'avoir une particule en x_1, une particule en x_2, etc... une particule en x_n.

Une première utilisation de ces marginales consiste en une réécriture de l'énergie en utilisant uniquement les deux premières marginales[5]:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}_N] &= N\int_\Omega V(x)d\boldsymbol{\mu}_N^{(1)}(x) + \lambda\frac{N(N-1)}{2}\iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y)d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y)\\ &= \iint_{\Omega\times\Omega}\left(\frac{N}{2}V(x)+\frac{N}{2}V(y)+\lambda\frac{N(N-1)}{2}w(x-y)\right)d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y), \quad (1.12)\end{aligned}$$

où on a utilisé la symétrie du Hamiltonien.

Approximation de champ moyen. Résoudre les problèmes ci-dessus a en général un coût prohibitif lorsque le nombre de particules devient grand. Pour obtenir des théories plus simples dont on puisse extraire plus facilement de l'information on a souvent recours à des approximations. La plus simple et la plus connue est l'approximation de champ moyen. On peut l'introduire de plusieures façons, le but étant d'obtenir un problème à un corps auto-consistant en partant du problème à N corps présenté ci-dessus.

Nous prenons ici le point de vue "chaos moléculaire" sur la théorie de champ moyen: l'approximation consiste à supposer que les particules sont indépendantes et identiquement distribuées (iid). On prend donc un ansatz de la forme

$$\boldsymbol{\mu}_N(x_1,\dots,x_N) = \rho^{\otimes N}(x_1,\dots,x_N) = \prod_{j=1}^N \rho(x_j) \quad (1.13)$$

où $\rho \in \mathcal{P}(\Omega)$ est une mesure de probabilité à un corps décrivant le comportement typique d'une des particules iid que l'on considère.

Les fonctionnelles d'énergie et d'énergie libre de champ moyen s'obtiennent en insérant cet ansatz dans (1.5) ou (1.8). La fonctionnelle d'énergie de champ moyen est donc[6]

$$\mathcal{E}^{\mathrm{MF}}[\rho] = N^{-1}\mathcal{E}[\rho^{\otimes N}] = \int_\Omega V(x)d\rho(x) + \lambda\frac{N-1}{2}\iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y)d\rho(x)d\rho(y) \quad (1.14)$$

dont on notera E^{MF} l'infimum parmi les mesures de probabilité. La fonctionnelle d'énergie libre de champ moyen s'obtient similairement:

$$\mathcal{F}^{\mathrm{MF}}[\rho] = N^{-1}\mathcal{F}[\rho^{\otimes N}] = \int_\Omega V(x)d\rho(x) + \lambda\frac{N-1}{2}\iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y)d\rho(x)d\rho(y) + T\int_\Omega \rho\log\rho \quad (1.15)$$

[5]Plus généralement, une énergie avec un potentiel à n corps peut se réécrire en utilisant la n-ième densité réduite.

[6]MF pour "Mean-Field".

et on notera $F^{\rm MF}$ son infimum. Le terme "champ moyen" provient du fait que le deuxième terme de (1.14) correspond à une interaction entre la densité de particules ρ et le potentiel auto-consistant (dont dérive le champ moyen)

$$\rho * w = \int_\Omega w(.-y)d\rho(y).$$

1.2. **Formalisme de la mécanique quantique et condensation de Bose-Einstein.**

Après ces rappels de mécanique classique, nous pouvons maintenant introduire les objets quantiques qui sont l'objet principal de ce cours. Nous nous contenterons d'un survol des principes de base de la physique quantique. D'autres présentations "mathematician-friendly" peuvent être trouvées dans [106, 160] Notre introduction des concepts nécessaires à la suite est par endroits volontairement simplifiée.

Fonctions d'onde et énérgie cinétique quantique. Un des postulats de base de la mécanique quantique est l'identification des états purs d'un système avec les vecteurs normalisés d'un espace de Hilbert complexe $\mathfrak{H}$. Pour des particules vivant dans l'espace de configuration $\mathbb{R}^d$, l'espace de Hilbert approprié pour une particules est $L^2(\mathbb{R}^d)$, l'espace des fonctions complexes de carré intégrable sur $\mathbb{R}^d$.

Etant donnée une particule dans l'état $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on identifie $|\psi|^2$ avec la densité de probabilité de présence: $|\psi(x)|^2$ représente la probabilité que la particule soit en x. On impose donc la normalisation

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 = 1.$$

On voit que même dans le cas d'un état pur, on ne peut pas spécifier avec certitude la position de la particule. Plus précisément *on ne peut pas spécifier simultanément sa position et sa vitesse.* Ce *principe d'incertitude* est une conséquence directe d'un autre postulat fondamental: $|\hat{\psi}|^2$ donne la densité de probabilité en vitesse de la particule, où $\hat{\psi}$ est la transformée de Fourier de ψ. En mécanique quantique l'énergie cinétique d'une particule est donc donnée par

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{|p|^2}{2}|\hat{\psi}(p)|^2 dp = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{2}|\nabla\psi(x)|^2 dx. \tag{1.16}$$

Le fait que la position et la vitesse d'une particule ne soient pas spécifiables simultanément vient du fait qu'il est impossible qu'à la fois $|\psi|^2$ et $|\hat{\psi}|^2$ convergent vers une masse de Dirac. Une façon populaire de quantifier ce fait est le principe d'incertitude de Heisenberg: pour tout $x_0 \in \mathbb{R}^d$

$$\left(\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\psi(x)|^2 dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}^d} |x-x_0|^2|\psi(x)|^2 dx\right) \geq C.$$

En effet, plus la position de la particule est connue avec précision plus le second terme du membre de gauche est petit (pour un certain x_0). Le premier terme du membre de gauche doit alors être très grand, ce qui au vu de (1.16) est incompatible avec le fait que la densité de vitesse soit concentrée autour d'un certain $p_0 \in \mathbb{R}^d$.

Pour de nombreuses applications (voir [103] pour une discussion de ce point), cette inégalité est en fait insuffisante, et une meilleure manière de quantifier le principe

d'incertitude est donnée par l'inégalité de Sobolev (ici dans sa version 3D):

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi|^2 \geq C \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^6 \right)^{1/3}.$$

Si la position de la particule est connue avec précision, $|\psi|^2$ doit approcher une masse de Dirac, auquel cas le membre de droite explose, et donc également les intégrales (1.16), avec la même interprétation que précédemment.

Bosons et Fermions. Pour un système de N particules quantiques dans $\mathbb{R}^d$, l'espace de Hilbert approprié est $L^2(\mathbb{R}^{dN}) \simeq \bigotimes^N L^2(\mathbb{R}^d)$. Un état pur du système est donc un certain $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$ et on interprète $|\Psi(x_1, \ldots, x_N)|^2$ comme la densité de probabilité pour que la particule 1 soit en x_1, ..., la particule N en x_N. Comme en mécanique classique, l'indiscernabilité des particules impose que

$$|\Psi(X)|^2 = |\Psi(X_\sigma)|^2 \tag{1.17}$$

pour toute permutation $\sigma \in \Sigma_N$. Cette condition est nécessaire pour décrire des particules indiscernables, mais elle n'est en fait pas suffisante, contrairement au cas de la mécanique classique. Pour écrire la bonne condition, on introduit l'opérateur unitaire U_σ qui intervertit les variables suivant $\sigma \in \Sigma_N$:

$$U_\sigma \; u_1 \otimes \ldots \otimes u_N = u_{\sigma(1)} \otimes \ldots \otimes u_{\sigma(N)}$$

pour tout $u_1, \ldots, u_N \in L^2(\mathbb{R}^d)$, étendu par linéarité à $L^2(\mathbb{R}^{dN}) \simeq \bigotimes^N L^2(\mathbb{R}^d)$ dont on peut construire une base en utilisant des vecteurs de forme $u_1 \otimes \ldots \otimes u_N$. Pour que $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$ décrive des particules indiscernables il faut demander

$$\langle \Psi, A\Psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} = \langle U_\sigma \Psi, A U_\sigma \Psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} \tag{1.18}$$

pour tout opérateur borné A agissant sur $L^2(\mathbb{R}^{dN})$. Sans rentrer dans des détails qui nous emmèneraient trop loin, la condition (1.18) correspond à demander que toute mesure (correspondant à une observable A) effectuée sur le système soit indépendante de la numérotation des particules. En mécanique classique, les mesures possibles correspondent toutes à des fonctions bornées sur l'espace des phases, et donc (1.3) garantit l'indépendance des observations vis à vis de la permutation des particules. En mécanique quantique, les observables sont les opérateurs bornés sur l'espace de Hilbert ambiant, et donc il faut imposer la condition plus forte (1.18).

Une conséquence importante[7] de la condition de symétrie (1.18) est qu'un système de particules quantiques indiscernables doit satisfaire une des deux conditions suivantes, plus fortes que (1.17): soit

$$\Psi(X) = \Psi(X_\sigma) \tag{1.19}$$

pour tout $X \in \mathbb{R}^{dN}$ et $\sigma \in \Sigma_N$, soit

$$\Psi(X) = \varepsilon(\sigma)\Psi(X_\sigma) \tag{1.20}$$

pour tout $X \in \mathbb{R}^{dN}$ et $\sigma \in \Sigma_N$, où $\varepsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation σ. On parle de bosons pour des particules décrites par des fonctions d'onde satisfaisant (1.19) et de fermions pour des particules décrites par une fonction d'onde satisfaisant (1.20). Ces deux types de particules fondamentales ont un comportement très différent, on parle de

[7] Il s'agit d'un exercice simple mais non trivial.

statistique bosonique ou fermionique [160]. Par exemple, les fermions obéissent au *principe d'exclusion de Pauli* qui stipule que deux fermions ne peuvent occuper simultanément le même état quantique. On peut déjà voir que (1.20) impose

$$\Psi(x_1,\dots,x_i,\dots,x_j,\dots,x_N) = -\Psi(x_1,\dots,x_j,\dots,x_i,\dots,x_N)$$

et donc (formellement)

$$\Psi(x_1,\dots,x_i,\dots,x_i,\dots,x_N) = 0$$

ce qui implique qu'il est impossible que deux fermions occupent simultanément la position x_i. On pourra consulter [106] pour un exposé des inégalités de Lieb-Thirring qui sont une des conséquences les plus importantes du principe de Pauli.

Concrètement, lorsqu'on étudie un système quantique, il convient de restreindre les états purs accessibles à ceux de type bosonique, ou ceux de type fermionique. On travaillera donc

- pour des bosons, dans $L^2_s(\mathbb{R}^{dN}) \simeq \bigotimes_s^N L^2(\mathbb{R}^d)$, l'espace des fonctions symétriques de carré intégrable, identifié avec le produit tensoriel symétrique de N copies de $L^2(\mathbb{R}^d)$.
- pour des fermions, dans $L^2_{as}(\mathbb{R}^{dN}) \simeq \bigotimes_{as}^N L^2(\mathbb{R}^d)$, l'espace des fonctions antisymétriques de carré intégrable, identifié avec le produit tensoriel antisymétrique de N copies de $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Comme son nom l'indique, la condensation de Bose-Einstein ne peut se produire que dans un système bosonique, et ce cours sera donc focalisé sur le premier cas.

Matrices de densité, Etats mixtes. On identifiera toujours un état pur $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$ avec la matrice de densité correspondante, c'est-à-dire le projecteur orthogonal sur Ψ, noté $|\Psi\rangle\langle\Psi|$. De même qu'en mécanique classique, les états mixtes du système sont par définition les superpositions statistiques d'états purs, c'est-à-dire ici les comibnaisons convexes de projecteurs orthogonaux. En utilisant le théorème spectral, il est clair que l'ensemble des états mixtes correspond à l'ensemble des opérateurs positifs de trace 1:

$$\mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^{dN})) = \left\{\Gamma \in \mathfrak{S}^1(L^2(\mathbb{R}^{dN})), \Gamma = \Gamma^*, \Gamma \geq 0, \operatorname{Tr}\Gamma = 1\right\} \tag{1.21}$$

où $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H})$ est la classe de Schatten [135, 155] des opérateurs à trace sur un espace de Hilbert $\mathfrak{H}$. Pour obtenir les états mixtes bosoniques (respectivement fermioniques) on considère respectivement

$$\mathcal{S}(L^2_{s/as}(\mathbb{R}^{dN})) = \left\{\Gamma \in \mathfrak{S}^1(L^2_{s/as}(\mathbb{R}^{dN})), \Gamma = \Gamma^*, \Gamma \geq 0, \operatorname{Tr}\Gamma = 1\right\}.$$

Notons que dans le langage des matrices densité, la symétrie bosonique correspond à demander

$$U_\sigma \Gamma = \Gamma \tag{1.22}$$

alors que la symétrie fermionique correspond à

$$U_\sigma \Gamma = \varepsilon(\sigma)\Gamma.$$

On considère parfois la notion de symétrie plus faible

$$U_\sigma \Gamma U_\sigma^* = \Gamma \tag{1.23}$$

qui est satisfaite par exemple par la superposition d'un état bosonique et d'un état fermionique.

Fonctionnelles d'énergie. La fonctionnelle d'énergie quantique correspondant au Hamiltonien classique non relativiste (1.4) s'obtient en opérant la substitution

$$p \leftrightarrow -i\nabla, \tag{1.24}$$

inspirée de l'identification (1.16) pour l'énergie cinétique d'un état quantique. Le Hamiltonien quantifié devient maintenant un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^{dN})$:

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} \left(-\frac{1}{2}\Delta_j + V(x_j) \right) + \lambda \sum_{1\leq i<j\leq N} w(x_i - x_j) \tag{1.25}$$

où $-\Delta_j = (-i\nabla_j)^2$ correspond au Laplacien dans la variable $x_j \in \mathbb{R}^d$. L'énergie correspondante est pour un état pur $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$

$$\mathcal{E}[\Psi] = \langle \Psi, H_N \Psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} \tag{1.26}$$

ce qui se généralise par linéarité au cas d'un état mixte $\Gamma \in \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^{dN}))$ en

$$\mathcal{E}[\Gamma] = \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{dN})}[H_N \Gamma]. \tag{1.27}$$

A température nulle, l'état d'équilibre du système s'obtient en minimisant la fonctionnelle d'énergie ci-dessus. Vus la linéarité de (1.27) en fonction de Γ et le théorème spectral, il est clair qu'on peut restreindre la minimisation aux états purs:

$$\begin{aligned} E_{s/as}(N) &= \inf \left\{ \mathcal{E}[\Gamma], \Gamma \in \mathcal{S}(L^2_{s/as}(\mathbb{R}^{dN})) \right\} \\ &= \inf \left\{ \mathcal{E}[\Psi], \Psi \in L^2_{s/as}(\mathbb{R}^{dN}), \|\Psi\|_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} = 1 \right\}. \end{aligned} \tag{1.28}$$

Ici on utilise à nouveau l'indice s (respectivement as) pour désigner l'énergie bosonique (respectivement fermionique). En l'absence d'indice il est entendu que la minimisation s'effectue sans contrainte de symétrie. Vue la symétrie du Hamiltonien, on pourra toutefois minimiser parmi les états mixtes satisfaisant (1.23), ou parmi les fonctions d'onde satisfaisant (1.17).

En présence d'agitation thermique, il convient de rajouter à l'énergie un terme incluant l'éntropie de Von-Neumann:

$$S[\Gamma] = -\,\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{dN})}[\Gamma \log \Gamma] = -\sum_j a_j \log a_j \tag{1.29}$$

où les a_j sont les valeurs propres (réelles positives) de Γ dont l'existence est garantie par le théorème spectral. Similairement à l'entropie classique (1.7), l'entropie de Von-Neumann est minimisée ($S[\Gamma] = 0$) par les états purs, i.e. les projecteurs, qui n'ont bien sûr qu'une valeur propre non nulle, égale à 1.

La fonctionnelle d'énergie libre quantique à température T est alors

$$\mathcal{F}[\Gamma] = \mathcal{E}[\Gamma] - TS[\Gamma] \tag{1.30}$$

et un minimiseur est en général un état mixte.

Autres formes pour l'énergie cinétique: champs magnétiques et effets relativistes. Nous n'avons introduit dans le cadre classique que la forme la plus simple possible pour l'énergie cinétique d'une particule. D'autres choix de relation entre p et l'énergie cinétique[8] sont possibles et, via la relation (1.24) elles changeront les espaces fonctionnels à utiliser.

Outre l'énergie cinétique non relativiste introduite ci-dessus, deux généralisations sont physiquement intéressants:

- En présence d'un champ magnétique $B : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}$ interagissant avec des particules chargées, on remplace
$$p \leftrightarrow -i\nabla + A \tag{1.31}$$
où $A : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$ est le *potentiel vecteur*[9], satisfaisant
$$B = \operatorname{curl} A.$$
L'opérateur d'énergie cinétique, prenant en compte la force de Lorentz, devient dans ce cas $(p+A)^2 = (-i\nabla + A)^2 = -(\nabla - iA)^2$ appellé *Laplacien magnétique.*

  Ce formalisme est également adapté au cas de particules dans un repère en rotation: en nommant x_3 l'axe de rotation il faut alors prendre $A = \Omega(-x_2, x_1, 0)$ avec Ω la vitesse de rotation, ce qui correspond à la prise en compte de la force de Coriolis. Dans ce cas, il faut aussi remplacer le potentiel $V(x)$ par $V(x) - \Omega^2|x|^2$ pour prendre en compte la force centrifuge.
- Lorsqu'on désire prendre en compte des effets relativistes, la relation de dispersion devient
$$\text{Energie cinétique} = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} - mc^2$$
avec m la masse et c la vitesse de la lumière dans le vide. En choisissant les unités pour que $c = 1$ et en rappelant (1.24) on est donc amené à considérer l'opérateur d'énergie cinétique
$$\sqrt{p^2 + m^2} - m = \sqrt{-\Delta + m^2} - m \tag{1.32}$$
qui se définit aisément en variables de Fourier par exemple. Dans la limite non relativiste où $|p| \ll m = mc$ on retrouve formellement l'opérateur $-\Delta$ au premier ordre. Une certaine caricature de cet opérateur est parfois utilisée, correspondant au cas "relativiste extrême" $|p| \gg mc$ où on prend comme opérateur d'énergie cinétique
$$\sqrt{p^2} = \sqrt{-\Delta}. \tag{1.33}$$
- On peut bien sûr combiner les deux généralisations pour considérer le cas de particules relativistes dans un champ magnétique en utilisant les opérateurs $\sqrt{(-i\nabla + A)^2 + m^2} - m$ et $|-i\nabla + A|$ basés sur la relation de dispersion relativiste et la correspondance (1.31).

[8] D'autres *relations de dispersion.*

[9] B ne détermine A qu'à un gradient près. Le choix de A s'appelle *choix de jauge.*

Matrices de densité réduites. De même qu'on a introduit précédemment les densités réduites d'un état classique, il sera très utile de disposer du concept correspondant en mécanique quantique. Etant donné un état mixte $\Gamma \in \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^{dN}))$ on définit sa n-ième matrice de densité réduite en prenant une trace partielle sur les $N-n$ dernières particules

$$\Gamma^{(n)} = \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\,\Gamma, \tag{1.34}$$

ce qui veut précisément dire que pour tout opérateur borné A_n sur $L^2(\mathbb{R}^{dn})$

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{dn})}[A_n\Gamma^{(n)}] := \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{dN})}[A_n \otimes \mathbb{1}^{\otimes N-n}\Gamma]$$

avec $\mathbb{1}$ l'identité sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. La définition ci-dessus se généralise facilement au cas d'un espace de Hilbert différent de L^2, mais le lecteur est peut-être plus familier avec la définition suivante, équivalente dans le cas où on travaille sur L^2. On identifie Γ avec son noyau, c'est-à-dire la fonction $\Gamma(X;Y)$ telle que pour tout $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$

$$\Gamma\,\Psi = \int_{\mathbb{R}^{dN}} \Gamma(X;Y)\Psi(Y)dY$$

et on peut alors également identifier $\Gamma^{(n)}$ avec son noyau

$$\Gamma^{(n)}(x_1,\dots,x_n;y_1,\dots,y_n) = \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)}} \Gamma(x_1,\dots,x_n,z_{n+1},\dots,z_N;y_1,\dots,y_n,z_{n+1},\dots,z_N)dz_{n+1}\dots dz_N.$$

Dans le cas où l'état Γ a une symétrie, par exemple bosonique ou fermionique, le choix des variables sur lesquelles on prend la trace partielle est arbitraire. Notons que même si on part d'un état pur, les matrices de densité réduites sont en général des états mixtes.

Similairement à (1.12) on peut réécrire l'énergie (1.27) sous la forme

$$\begin{aligned}\mathcal{E}[\Gamma] &= N\,\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^d)}\left[\left(-\frac{1}{2}\Delta + V\right)\Gamma^{(1)}\right] + \lambda\frac{N(N-1)}{2}\,\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}[w(x-y)\Gamma^{(2)}] \\ &= \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}\left[\left(\frac{N}{2}\left(-\frac{1}{2}\Delta_x + V(x) - \frac{1}{2}\Delta_y + V(y)\right) + \lambda\frac{N(N-1)}{2}w(x-y)\right)\Gamma^{(2)}\right].\end{aligned} \tag{1.35}$$

Approximation de champ moyen. Exactement comme en mécanique classique, résoudre en pratique le problème de minimisation (1.28) pour N grand est bien trop coûteux, et il est souvent nécessaire d'avoir recours à des approximations. Ce cours a pour but d'étudier la plus simple de ces approximations, qui consiste à imiter (1.13) en prenant un ansatz décrivant des particules iid

$$\Psi(x_1,\dots,x_N) = u^{\otimes N}(x_1,\dots,x_N) = u(x_1)\dots u(x_N) \tag{1.36}$$

pour un certain $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$. En insérant cette forme dans la fonctionnelle d'énergie (1.35) on obtient la fonctionnelle de Hartree

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] = N^{-1}\mathcal{E}[u^{\otimes N}] = \int_{\mathbb{R}^d}\left(\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + V|u|^2\right) + \lambda\frac{N-1}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d}|u(x)|^2 w(x-y)|u(y)|^2 \tag{1.37}$$

et le problème de minimisation correspondant est

$$e_{\mathrm{H}} = \inf\left\{\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u], \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1\right\}. \tag{1.38}$$

On notera que l'on passe ainsi d'un problème linéaire en la fonction d'onde à N corps (puisque la fonctionnelle d'énergie à N corps en quadratique en la fonction d'onde, l'équation variationnelle correspondante est linéaire) à un problème cubique en la fonction d'onde à un corps u (puisque la fonctionnelle de Hartree est quartique en la fonction d'onde, l'équation variationnelle correspondante est cubique).

L'ansatz (1.36) est une fonction d'onde symétrique, qui convient pour des bosons. Elle correspond à chercher le fondamental sous la forme d'un condensat de Bose-Einstein où toutes les particules sont dans l'état u. A cause du principe de Pauli, des fermions ne peuvent en fait jamais être complètement décorrélés au sens de la forme (1.36). L'ansatz de champ moyen pour des fermions consiste à prendre

$$\Psi(x_1,\dots,x_N) = \det\left(u_j(x_k)\right)_{1\leq j,k\leq N}$$

avec $u_1,\dots,u_N$ des fonctions orthonormales (orbitales du sytème) dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Cet ansatz mène à la fonctionnelle de Hartree-Fock dont on ne parlera pas dans ces notes (une présentation dans le même esprit et des références se trouvent dans [140]).

Remarquons que dans l'approximation de champ moyen (1.13) pour des particules classiques, on autorise un état mixte ρ. Pour décrire un système bosonique, on prend toujours un état pur u dans l'ansatz (1.36), ce qui appelle les commentaires suivants:

- si on prend un état général $\gamma \in \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^d))$, l'état à N corps défini comme
$$\Gamma = \gamma^{\otimes N} \tag{1.39}$$
a la symétrie bosonique (1.22) si et seulement si γ est un état pur (voir par exemple [82]), $\gamma = |u\rangle\langle u|$, auquel cas $\Gamma = |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|$ et on revient à l'ansatz (1.36).
- dans le cas de la fonctionnelle d'énergie ci-dessus, le problème de minimisation avec symétrie bosonique imposée et le problème sans symétrie coïncident (cf par exemple [106, Chapitre 3]), on peut donc minimiser sans contrainte, et on retombera sur l'énergie bosonique. Ceci reste vrai dans le cas où l'énergie cinétique est (1.32) ou (1.33) mais est notoirement faux en présence d'un champ magnétique.
- pour certaines fonctionnelles d'énergie, par exemple en présence d'un champ magnétique ou de rotation, le minimum sans symétrie est strictement inférieur au minimiseur avec symétrie, cf [147]. L'ansatz (1.39) est alors approprié pour approximer le minimum du problème sans symétrie (au vu de la symétrie du Hamiltonien, on peut toujours supposer la symétrie (1.23)) et on obtient alors une foncionnelle de Hartree généralisée pour des états mixtes à un corps $\gamma \in \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^d))$

$$\mathcal{E}_{\rm H}[\gamma] = \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^d)}\left[\left(-\frac{1}{2}\Delta + V\right)\gamma\right] + \lambda\frac{N-1}{2}\,\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}\left[w(x-y)\gamma^{\otimes 2}\right]. \tag{1.40}$$

Les deux sections suivantes introduisent, respectivement dans le cas classique et le cas quantique, la question qui est l'objet principal de ces notes:

Peut-on justifier dans une certaine limite la validité des ansatz de champ moyen (1.13) *et* (1.36) *pour la détermination des états d'équilibre d'un sytème de particules indiscernables ?*

1.3. **Champ moyen et théorème de de Finetti classique.**

Est-il légitime de procéder à la simplification (1.13) pour déterminer les états d'équilibre d'un système classique ? L'expérience montre que c'est le cas lorsque les particules sont en grand nombre, ce qu'on matérialise mathématiquement par l'étude de la limite $N \to \infty$ des problèmes qui nous occupent.

Un cadre simple où on peut justifier la validité de l'*approximation* de champ moyen est la *limite* de champ moyen où l'on suppose que tous les termes de l'énergie (1.5) pèsent le même poids. Au vu de (1.12), cette condition est remplie si λ est d'ordre N^{-1}, par exemple

$$\lambda = \frac{1}{N-1}, \tag{1.41}$$

auquel cas on peut s'attendre à ce que l'énergie fondamentale par particule $N^{-1}E(N)$ ait une limite bien définie. Le choix particulier (1.41) sert à simplifier certaines expressions, mais les considérations suivantes s'appliquent tant que λ est d'ordre N^{-1}. Insistons sur le caractère simplifié de l'étude de la limite $N \to \infty$ sous l'hypothèse (1.41), qui est loin de recouvrir tous les cas physiquement intéressants. Il s'agit cependant d'un problème déjà non trivial et très instructif.

Le but de cette section est de discuter l'approximation de champ moyen pour les états d'équilibre d'un système classique à température nulle. On s'intéresse donc au problème de minimisation

$$E(N) = \inf \left\{ \int_{\Omega^N} H_N d\boldsymbol{\mu}_N,\ \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N) \right\} \tag{1.42}$$

avec

$$H_N(X) = \sum_{j=1}^{N} V(x_j) + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \le i < j \le N} w(x_i - x_j). \tag{1.43}$$

Nous allons esquisser la preuve (formelle) de la validité de l'approximation de champ moyen au niveau de l'énergie fondamentale, autrement dit de l'égalité

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = E^{\mathrm{MF}} = \inf \left\{ \mathcal{E}^{\mathrm{MF}}[\rho], \rho \in \mathcal{P}(\Omega) \right\} \tag{1.44}$$

où la fonctionnelle de champ moyen est obtenue comme en (1.14), en tenant compte de (1.41):

$$\mathcal{E}^{\mathrm{MF}}[\rho] = \int_\Omega V d\rho + \frac{1}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y) d\rho(x) d\rho(y). \tag{1.45}$$

Obtenir la limite (1.44) pour l'énergie fondamentale est une première étape, et le schéma de preuve fournit en fait des informations sur les états d'équilibre. Pour simplifier la présentation (formelle) qui suit, nous renvoyons la discussion de ces aspects, ainsi que l'étude du cas à température positive, au Chapitre 2.

Un passage à la limite formel. Cette section a pour but de souligner la structure "algébrique" du problème. La justification des manipulations auxquelles nous allons nous livrer nécessite des hypothèses d'analyse qui seront discutées dans la suite du cours mais que nous passons sous silence pour l'instant.

On commence par utiliser (1.12) et l'hypothèse (1.41) pour écrire

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2} \inf \left\{ \iint_{\Omega\times\Omega} H_2(x,y) d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y),\ \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N) \right\}$$

où H_2 est le Hamiltonien à deux particules défini comme en (1.43) et $\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}$ est la seconde marginale de la probabilité symétrique $\boldsymbol{\mu}_N$. Puisque l'énergie ne dépend que de la seconde marginale, on peut voir le problème qui nous intéresse comme un problème d'optimisation avec contrainte pour des probabilités à deux corps symétriques:

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2} \inf \left\{ \iint_{\Omega\times\Omega} H_2(x,y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y), \boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \mathcal{P}_N^{(2)} \right\}$$

avec

$$\mathcal{P}_N^{(2)} = \left\{ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \mathcal{P}_s(\Omega^2) \,|\, \exists \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N), \boldsymbol{\mu}^{(2)} = \boldsymbol{\mu}_N^{(2)} \right\}$$

l'ensemble des probabilités à deux corps qu'on peut obtenir comme les marginales d'états à N corps. En supposant que la limite existe (premier argument formel) on obtient donc

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2} \lim_{N\to\infty} \inf \left\{ \iint_{\Omega\times\Omega} H_2(x,y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y), \boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \mathcal{P}_N^{(2)} \right\} \tag{1.46}$$

et il est tentant d'échanger la limite et l'infimum dans cette expression (deuxième argument formel) pour obtenir

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2} \inf \left\{ \iint_{\Omega\times\Omega} H_2(x,y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y), \boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \lim_{N\to\infty} \mathcal{P}_N^{(2)} \right\}.$$

On a observé que la fonctionnelle d'énergie apparaissant dans (1.46) est en fait indépendante de N. Toute la dépendance en N se trouve dans la contrainte sur l'espace variationnel que l'on considère. Ceci suggère que le problème limite naturel consiste à minimiser la même fonctionnelle mais sur la limite de l'espace variationnel, comme écrit ci-dessus.

Pour donner un sens à la limite de $\mathcal{P}_N^{(2)}$, on constate que les ensembles $\mathcal{P}_N^{(2)}$ forment une suite décroissante

$$\mathcal{P}_{N+1}^{(2)} \subset \mathcal{P}_N^{(2)}$$

comme on s'en aperçoit facilement en notant que si $\boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \mathcal{P}_{N+1}^{(2)}$, alors pour un certain $\boldsymbol{\mu}_{N+1} \in \mathcal{P}_s(\Omega^{N+1})$

$$\boldsymbol{\mu}^{(2)} = \boldsymbol{\mu}_{N+1}^{(2)} = \left(\boldsymbol{\mu}_{N+1}^{(N)} \right)^{(2)} \tag{1.47}$$

et bien sûr $\boldsymbol{\mu}_{N+1}^{(N)} \in \mathcal{P}_s(\Omega^N)$. On peut donc légitimement faire l'identification

$$\mathcal{P}_\infty^{(2)} := \lim_{N\to\infty} \mathcal{P}_N^{(2)} = \bigcap_{N\geq 2} \mathcal{P}_N^{(2)}$$

et le problème limite naturel est alors (modulo la justification des manipulations formelles ci-dessus)

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = E_\infty = \frac{1}{2} \inf \left\{ \iint_{\Omega\times\Omega} H_2(x,y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y), \boldsymbol{\mu}^{(2)} \in \mathcal{P}_\infty^{(2)} \right\}, \tag{1.48}$$

soit un problème variationnel sur l'ensemble des états à deux corps que l'on peut obtenir comme densités réduites d'états à N corps, pour tout N.

Un résultat de structure. Nous allons maintenant expliquer qu'en fait

$$E_\infty = E^{\rm MF},$$

ce qui découle d'un résultat fondamental sur la structure de l'espace $\mathcal{P}_\infty^{(2)}$.

Regardons de plus près l'espace $\mathcal{P}_\infty^{(2)}$. Il contient bien sûr les états produits de forme $\rho \otimes \rho, \rho \in \mathcal{P}(\Omega)$ puisque $\rho^{\otimes 2}$ est la seconde marginale de $\rho^{\otimes N}$ pour tout N. Par convexité il contient également toutes les combinaisons convexes de tels états

$$\left\{ \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes 2} dP(\rho), P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega)) \right\} \subset \mathcal{P}_\infty^{(2)} \tag{1.49}$$

avec $\mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ l'ensemble des mesures de probabilité sur $\mathcal{P}(\Omega)$. Au vu de (1.12) et (1.45) on aura justifié l'approximation de champ moyen (1.44) si on peut montrer que l'infimum dans (1.48) est atteint pour $\boldsymbol{\mu}^{(2)} = \rho^{\otimes 2}$ pour un certain $\rho \in \mathcal{P}(\Omega)$.

Le résultat de structure qui permet d'atteindre cette conclusion est la constation qu'il y a en fait égalité dans (1.49):

$$\left\{ \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes 2} dP(\rho), P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega)) \right\} = \mathcal{P}_\infty^{(2)}. \tag{1.50}$$

En effet, vu la linéarité de la fonctionnelle d'énergie en fonction de $\boldsymbol{\mu}^{(2)}$, on peut écrire

$$\begin{aligned} E_\infty &= \frac{1}{2} \inf \left\{ \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \iint_{\Omega \times \Omega} H_2(x,y) d\rho^{\otimes 2}(x,y) dP(\rho), P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega)) \right\} \\ &= \inf \left\{ \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \mathcal{E}^{\rm MF}[\rho] dP(\rho), P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega)) \right\} \\ &= E^{\rm MF} \end{aligned}$$

puisqu'il est clair que l'infimum en $P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ est atteint pour $P = \delta_{\varrho^{\rm MF}}$, une masse de Dirac en $\varrho^{\rm MF}$, un minimiseur de $\mathcal{E}^{\rm MF}$.

On voit donc que en acceptant les manipulations formelles (justifiées au Chapitre 2) menant à (1.48), la validité de l'approximation de champ moyen suit en utilisant très peu les propriétés du Hamiltonien mais beaucoup la structure des états symétriques à N corps, sous la forme de l'égalité (1.50).

Cette égalité est une conséquence du théorème de Hewitt-Savage, ou théorème de Finetti classique [43, 44, 81], rappellé à la Section 2.1 et démontré à la Section 2.2. Donnons quelques détails pour le lecteur familiarisé. Il s'agit de montrer l'inclusion inverse dans (1.49). On prend donc un certain $\boldsymbol{\mu}^{(2)}$ qui satisfait

$$\boldsymbol{\mu}^{(2)} = \boldsymbol{\mu}_N^{(2)}$$

pour une certaine suite $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N)$. En se basant sur l'observation (1.47) on peut supposer que

$$\boldsymbol{\mu}_{N+1}^{(N)} = \boldsymbol{\mu}_N$$

et on est alors en présence d'une suite (hiérarchie) d'états à N corps consistante. Il existe alors (théorème d'extension de Kolmogorov) une probabilite symétrique sur les suites de Ω,

$\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$ telle que

$$\boldsymbol{\mu}_N = \boldsymbol{\mu}^{(N)}$$

où la N-ème marginale est définie comme en (1.11). Le théorème de Hewitt-Savage [81] garantit alors l'existence d'une unique mesure de probabilité $P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ telle que

$$\boldsymbol{\mu}_N = \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes N} dP(\rho)$$

et en prenant la seconde marginale, on obtient le résultat souhaité.

Le Chapitre 2 est consacré entre autres aux détails du schéma de preuve ci-dessus. On y fera des hypothèses adéquates permettant de mettre toutes ces considérations sur une base rigoureuse. Il vaut cependant la peine de noter dès maintenant que ce schéma (inspiré des références [125, 85, 84, 85, 25, 87]) n'utilise aucune propriété de structure du Hamiltonien (signe des interactions, répulsives ou attractives, par exemple) mais uniquement des propriétés de compacité et de régularité.

1.4. **Champ moyen et théorème de de Finetti quantique.**

Nous allons maintenant esquisser une stratégie pour justifier l'approximation de champ moyen au niveau de l'énergie fondamentale d'un grand système bosonique. La démarche est la même que pour le cas classique ci-dessus. On se place dans un régime de champ moyen comme précédement en prenant $\lambda = (N-1)^{-1}$ et on considère donc le Hamiltonien

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} -\left(\nabla_j + iA(x_j)\right)^2 + V(x_j) + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(x_i - x_j) \tag{1.51}$$

agissant sur $L^2(\mathbb{R}^{dN})$. Par rapport à la situation précédente nous avons rajouté un potentiel vecteur A pour commencer de souligner la généralité de l'approche. Il peut par exemple correspondre à un champ magnétique externe $B = \operatorname{curl} \mathrm{A}$.

Le point de départ est l'énergie fondamentale bosonique définie précédemment

$$\begin{aligned} E(N) &= \inf \left\{ \operatorname{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} \left[H_N \Gamma_N \right], \Gamma_N \in \mathcal{S}(L^2_s(\mathbb{R}^{dN})) \right\} \\ &= \inf \left\{ \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle, \Psi_N \in L^2_s(\mathbb{R}^{dN}), \|\Psi_N\|_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} = 1 \right\} \end{aligned} \tag{1.52}$$

et l'on rappelle que l'on peut minimiser sur les états purs ou les états mixtes indifférement, d'où les deux définitions équivalentes.

Notre but est de montrer que pour N grand l'énergie bosonique par particule est donnée par la fonctionnelle de Hartree:

$$\lim_{N \to \infty} \frac{E(N)}{N} = e_{\mathrm{H}} \tag{1.53}$$

où

$$\begin{aligned} e_{\mathrm{H}} &= \inf \left\{ \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u], u \in L^2(\mathbb{R}^d), \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1 \right\} \\ \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(|(\nabla + iA)u|^2 + V|u|^2 \right) + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |u(x)|^2 w(x-y) |u(y)|^2 dxdy. \end{aligned} \tag{1.54}$$

Puisque l'énergie de Hartree est obtenue en insérant un ansatz $\Psi_N = u^{\otimes N}$ dans la fonctionnelle d'énergie à N corps, la limite (1.53) est déjà une indication forte de l'existence de

la condensation de Bose-Einstein au niveau du fondamental d'un grand système bosonique dans le régime de champ moyen. On reviendra plus bas sur les conséquences de (1.53) sur les minimiseurs. Comme dans le cas classique, le régime de champ moyen est un modèle très simplifié mais déjà très instructif. On présentera au Chapitre 7 l'analyse d'autres limites physiquement intéressantes.

Un passage à la limite formel. La première étape pour obtenir (1.53) est comme dans le cas classique d'obtenir formellement un problème limite simplifié. On commence par réécrire l'énergie en utilisant (1.35) et l'hypothèse $\lambda = (N-1)^{-1}$

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2} \inf \left\{ \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \left[H_2 \Gamma^{(2)} \right], \, \Gamma^{(2)} \in \mathcal{P}_N^{(2)} \right\} \tag{1.55}$$

où

$$\mathcal{P}_N^{(2)} = \left\{ \Gamma^{(2)} \in \mathcal{S}(L^2_s(\mathbb{R}^{2d})) \, | \, \exists \, \Gamma_N \in \mathcal{S}(L^2_s(\mathbb{R}^{dN})), \Gamma^{(2)} = \mathrm{Tr}_{3 \to N}[\Gamma_N] \right\}$$

est l'ensemble des matrices densité à deux corps "N-représentables", i.e. qui sont la trace partielle d'un état à N corps.

La caractérisation de l'ensemble $\mathcal{P}_N^{(2)}$ est un problème ouvert fameux en mécanique quantique (problème de représentabilité, voir par exemple [36, 106]) et la réécriture (1.55) n'est donc pas particulièrement utile à N fixé. En revanche, exactement comme dans le cas classique, le problème de représentabilité peut être résolu de manière satisfaisante dans la limite $N \to \infty$, et c'est ce fait que nous allons utiliser. On commence par noter que en prenant des traces partielles on a facilement

$$\mathcal{P}_{N+1}^{(2)} \subset \mathcal{P}_N^{(2)} \tag{1.56}$$

de sorte que (1.55) peut être vu comme un problème variationnel posé sur un espace de plus en plus contraint lorsque N augmente.

En supposant à nouveau qu'on puisse échanger un infimum et une limite (ce qui est bien sûr un argument formel) on obtient

$$\lim_{N \to \infty} \frac{E(N)}{N} = E_\infty := \frac{1}{2} \inf \left\{ \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \left[H_2 \Gamma^{(2)}, \Gamma^{(2)} \in \mathcal{P}_\infty^{(2)} \right] \right\} \tag{1.57}$$

avec

$$\mathcal{P}_\infty^{(2)} = \lim_{N \to \infty} \mathcal{P}_N^{(2)} = \bigcap_{N \geq 2} \mathcal{P}_N^{(2)} \tag{1.58}$$

l'ensemble des matrices densité à deux corps qui sont N-représentables pour tout N. On a comme dans le cas classique utilisé le fait que la fonctionnelle d'énergie elle même ne dépend pas de N pour passer formellement à la limite.

Un résultat de structure. Il se trouve que la structure de l'ensemble $\mathcal{P}_\infty^{(2)}$ est entièrement connue et entraîne l'égalité

$$E_\infty = e_{\mathrm{H}} \tag{1.59}$$

qui conclut la preuve de (1.53) modulo la justification des manipulations formelles que nous venons d'effectuer.

La propriété de structure garantissant la validité (1.59) est une version quantique du théorème de de Finetti-Hewitt-Savage que nous avons mentionné à la section précédente. Soit $\Gamma^{(2)} \in \mathcal{P}_\infty^{(2)}$. On a alors une suite $\Gamma_N \in \mathcal{S}(L^2_s(\mathbb{R}^{dN}))$ telle que pour tout N

$$\Gamma^{(2)} = \Gamma_N^{(2)}.$$

Sans perte de généralité on peut supposer que cette suite est consistante au sens où

$$\Gamma_{N+1}^{(N)} = \mathrm{Tr}_{N+1}[\Gamma_{N+1}] = \Gamma_N.$$

Le théorème de de Finetti quantique de Størmer-Hudson-Moody [164, 82] garantit alors l'existence d'une mesure de probabilité $P \in \mathcal{P}(SL^2(\mathbb{R}^d))$ sur la sphère unité de $L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que

$$\Gamma_N = \int_{u\in SL^2(\mathbb{R}^d)} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}| dP(u)$$

et donc

$$\Gamma^{(2)} = \int_{u\in SL^2(\mathbb{R}^d)} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| dP(u).$$

On peut alors conclure que

$$\begin{aligned} E_\infty &= \inf\left\{ \frac{1}{2}\int_{u\in SL^2(\mathbb{R}^d)} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}[H_2 |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|] dP(u), P \in \mathcal{P}(SL^2(\mathbb{R}^d)) \right\} \\ &= \inf\left\{ \int_{u\in SL^2(\mathbb{R}^d)} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] dP(u), P \in \mathcal{P}(SL^2(\mathbb{R}^d)) \right\} \\ &= e_{\mathrm{H}} \end{aligned}$$

où la dernière égalité suit puisqu'il est clairement optimal de prendre $P = \delta_{u_{\mathrm{H}}}$ avec u_{H} un minimiseur de la fonctionnelle de Hartree.

On voit donc que la validité de (1.53) est (au moins formellement) une conséquence de la structure de l'ensemble des états bosoniques et ne fait intervenir que marginalement les propriétés du Hamiltonien (1.51). La justification sous diverses hypothèses des manipulations formelles que nous venons d'effectuer pour obtenir (1.57) (ou une variante) ainsi que la preuve du théorème de de Finetti quantique (plus variantes, généralisations et corollaires) sont l'objet principal de ces notes.

Condensation de Bose-Einstein. Anticipons quelque peu sur les conclusions quant aux minimiseurs que l'on peut déduire de la limite (1.53). On verra dans la suite du cours que des résultats du type

$$\Gamma_N^{(n)} \to \int_{u\in SL^2(\mathbb{R}^d)} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| dP(u) \tag{1.60}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$ fixé quand $N \to \infty$, suivent très naturellement dans les bons cas, où Γ_N est (la matrice densité d') un minimiseur de l'énergie à N corps et P une mesure de probabilité concentrée sur les minimiseurs de $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$. La convergence aura lieu (toujours dans les "bons cas") en norme de trace.

Lorsque il y a unicité (à une phase constante près) du minimiseur u_{H} de $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$ on obtient donc

$$\Gamma_N^{(n)} \to |u_{\mathrm{H}}^{\otimes n}\rangle\langle u_{\mathrm{H}}^{\otimes n}| \text{ quand } N \to \infty \tag{1.61}$$

ce qui prouve l'existence de la condensation de Bose-Einstein au niveau du fondamental. En effet, la condensation de Bose-Einstein consiste *par définition* (voir [107] et références ci-incluses, en particulier [127]) en l'existence d'une valeur propre d'ordre[10] 1 dans la limite $N \to \infty$ pour $\Gamma_N^{(1)}$, ce qui est clairement impliqué par (1.61) qui est en fait un résultat plus fort.

On peut bien sûr se demander si des résultats plus forts que (1.61) peuvent être démontrés. On pourrait penser à une approximation en norme du genre

$$\left\| \Psi_N - u_{\mathrm{H}}^{\otimes N} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^{dN})} \to 0,$$

mais il est opportun de mentionner tout de suite que des résultats de ce genre sont *faux* en général. La bonne notion de condensation fait bien intervenir les matrices densité réduites, comme le montrent les deux remarques suivantes:

- Pensons à un Ψ_N de forme
$$\Psi_N = u_{\mathrm{H}}^{\otimes (N-1)} \otimes_s \varphi$$
où φ est orthogonal à u_{H}. Un tel état est "presque condensé" puisque toutes les particules sauf une sont dans l'état u_{H}. Hors, au sens $L^2(\mathbb{R}^{dN})$ usuel, Ψ_N est bien sûr orthogonal à $u_{\mathrm{H}}^{\otimes N}$ et ne peut donc pas en être proche en norme, bien qu'il en soit proche au sens de la condensation faisant intervenir les matrices de densité réduites.
- Dans le même ordre d'idée, il est naturel de chercher des corrections au minimiseur à N corps sous la forme
$$\Psi_N = \varphi_0 \, u_{\mathrm{H}}^{\otimes N} + u_{\mathrm{H}}^{\otimes (N-1)} \otimes_s \varphi_1 + u_{\mathrm{H}}^{\otimes (N-2)} \otimes_s \varphi_2 + \ldots + \varphi_N$$
avec $\varphi_0 \in \mathbb{C}$ et $\varphi_k \in L^2_s(\mathbb{R}^{dk})$ pour $k = 1 \ldots N$. Il se trouve que l'ansatz ci-dessus est correct si la suite $(\varphi_k)_{k=0,\ldots,N}$ est choisie via la minimisation d'un Hamiltonien effectif sur l'espace de Fock. La présence des termes non condensés impliquant les φ_k pour $k \geq 1$ contribue au premier ordre à la norme de Ψ_N mais pas aux matrices de densité réduites, ce qui confirme rigoureusement que la bonne notion de condensation est nécessairement basée sur les matrices densité réduites. Cette remarque ne fait qu'effleurer la théorie de Bogoliubov, qui ne sera pas traitée dans ces notes et au sujet de laquelle on renvoit à [39, 111, 112, 159, 148, 75, 99, 126, 49] pour des résultats mathématiques récents.

Une remarque sur la symétrie. Nous nous sommes intéressés ci-dessus au problème bosonique pour des raisons de motivation physique. Le problème fermionique n'est[11] pas couvert par ce genre de considérations, mais on peut s'intéresser au problème sans contrainte de symétrie mentionné précédement.

Dans le cas où $A \equiv 0$ dans (1.51), les problèmes avec et sans symétrie bosonique imposée coïncident, mais ce n'est pas le cas en général. On peut cependant suivre la même démarche que ci-dessus pour l'étude du problème sans symétrie en remarquant que vue la forme du Hamiltonien, on peut sans perte de généralité imposer la symétrie plus faible (1.23) dans la minimisation. L'ensemble de matrices de densité à deux corps qui apparaît alors à la

[10] Rappellons que toutes les matrices densité sont normalisées pour avoir une trace fixe dans ce cours.

[11] Pour l'instant ?

limite est également couvert par le théorème de Størmer-Hudson-Moody, et il s'agit alors de minimiser une énergie sur les matrices de densité à deux corps de la forme

$$\Gamma^{(2)} = \int_{\gamma \in \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^d))} \gamma^{\otimes 2} dP(\gamma) \tag{1.62}$$

où P est maintenant une mesure de probabilité sur les états à une particule, c'est-à-dire les opérateurs auto-adjoints positifs de trace 1 sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. On obtient donc dans ce cas la convergence de l'énergie fondamentale par particule vers le minimum de la fonctionnelle de Hartree généralisée (cf (1.40))

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\gamma] = \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^d)} \left[\left(-(\nabla + iA)^2 + V \right) \gamma \right] + \lambda \frac{N-1}{2} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \left[w(x-y) \gamma^{\otimes 2} \right]$$

et le minimum est en général différent du minimum de la fonctionnelle de Hartree (1.54) (voir par exemple [147]).

On a déjà noté que $\gamma^{\otimes 2}$ ne peut avoir la symétrie bosonique que si γ est un état pur $\gamma = |u\rangle\langle u|$, et on voit donc en quoi le problème sans symétrie peut en général donner lieu à un minimum strictement plus petit. Il se trouve que le minimum de (1.40) est toujours atteint pour un état pur, ce qui met en cohérence les différentes observations que nous avons faites sur la symétrie. Notons finalement que prendre en compte la symétrie bosonique dans la limite de champ moyen quand $A \neq 0$ se fait tout naturellement grâce aux différentes version du théorème de de Finetti quantique.

2. Mécanique statistique à l'équilibre

Avant d'entrer dans le coeur du sujet de ces notes, les limites de champ moyen quantiques, nous rappellerons dans un but pédagogique quelques notions sur les limites de champ moyen classiques. Dans cette section nous énoncerons et démontrerons les théorèmes de de Finetti classiques mentionnés informellement auparavant. Des applications à des problèmes de mécanique statistique à l'équilibre seront ensuite présentées.

Pour simplifier l'exposition et se rapprocher des applications qui nous intéressent nous considérerons dans toute cette section un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ qui pourra éventuellement être $\mathbb{R}^d$ lui-même. On notera Ω^N et $\Omega^{\mathbb{N}}$ le produit cartésien de N copies de Ω et l'ensemble des suites de Ω respectivement. L'espace des mesures de probabilités sur un ensemble Λ sera toujours noté $\mathcal{P}(\Lambda)$. On pourra faire l'hypothèse simplificatrice que Ω est compact, auxquel cas $\mathcal{P}(\Omega)$ l'est également pour la convergence faible des mesures.

2.1. Théorème de Hewitt-Savage.

Nous mentionnerons seulement pour mémoire les premiers travaux sur ce qui est appellé maintenant le théorème de de Finetti [43, 44, 83, 51]. Dans ces notes, l'histoire commencera à [81] où le théorème de de Finetti classique est démontré dans sa forme la plus générale.

De manière informelle, le théorème de Hewitt-Savage [81] énonce que toute mesure de probabilité symétrique sur Ω^N approche une combinaison convexe de probabilités produit quand N est grand. Une *mesure de probabilité symétrique* est une probabilité $\boldsymbol{\mu}_N$ satisfaisant

$$\boldsymbol{\mu}_N(A_1 \times \ldots \times A_N) = \boldsymbol{\mu}_N(A_{\sigma(1)}, \ldots, A_{\sigma(N)}) \tag{2.1}$$

pour tout domaines boréliens $A_1, \ldots, A_N \subset \Omega$ et toute permutation de N indices $\sigma \in \Sigma_N$. On notera $\mathcal{P}_s(\Omega^N)$ l'ensemble des mesures de probabilité satisfaisant (2.1). Une *mesure produit* construite sur $\rho \in \mathcal{P}(\Omega)$ est de la forme

$$\rho^{\otimes N}(A_1, \ldots, A_N) = \rho(A_1) \ldots \rho(A_N) \tag{2.2}$$

et est bien entendu symétrique. Nous cherchons donc un résultat du genre

$$\boldsymbol{\mu}_N \approx \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes N} dP_{\boldsymbol{\mu}_N}(\rho) \text{ quand } N \to \infty \tag{2.3}$$

où $P_{\boldsymbol{\mu}_N} \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ est une mesure de probabilité sur les probabilités.

Une première possibilité pour donner un sens rigoureux à (2.3) consiste à prendre immédiatement $N = \infty$, c'est-à-dire à considérer non pas une probabilité $\boldsymbol{\mu}_N$ sur Ω^N mais directement une probabilité avec un nombre infini de variables, $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}(\Omega^{\mathbb{N}})$, ce qui est le sens naturel à donner à un "état classique d'un système à nombre infini de particules". On supposera une notion de symétrie héritée de (2.1):

$$\boldsymbol{\mu}(A_1, A_2, \ldots) = \boldsymbol{\mu}(A_{\sigma(1)}, A_{\sigma(2)}, \ldots) \tag{2.4}$$

pour toute suite de domaines boréliens $(A_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \Omega^{\mathbb{N}}$ et toute permutation d'un nombre infini d'indices $\sigma \in \Sigma_\infty$. On notera $\mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$ l'ensemble des probabilités sur $\Omega^{\mathbb{N}}$ satisfaisant (2.4). Le théorème de Hewitt-Savage est le résultat suivant:

Théorème 2.1 (Hewitt-Savage 1955)**.**
Soit $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$ satisfaisant (2.4)*. Soit $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ sa n-ième marginale définie par*

$$\boldsymbol{\mu}^{(n)}(A_1, \ldots, A_n) = \boldsymbol{\mu}(A_1, \ldots, A_n, \Omega, \ldots, \Omega, \ldots). \tag{2.5}$$

Il existe une unique mesure de probabilité $P_{\boldsymbol{\mu}} \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ telle que

$$\boldsymbol{\mu}^{(n)} = \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes n} dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho). \tag{2.6}$$

En mécanique statistique, ce théorème est généralement appliqué comme une version faible de l'approximation formelle (2.3) de la manière suivante. On part d'un état classique à N particules, une probabilité $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}(\Omega^N)$ dont les marginales

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}(A_1, \dots, A_n) = \boldsymbol{\mu}(A_1, \dots, A_n, \Omega^{N-n}) \tag{2.7}$$

convergent[12] dans le sens des mesures de $\mathcal{P}(\Omega^n)$, à une sous-suite près (nous ne changerons pas de notation pour la sous-suite):

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \boldsymbol{\mu}^{(n)} \in \mathcal{P}(\Omega^{(n)}), \tag{2.8}$$

ce qui veut précisément dire que

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}(A_n) \to \boldsymbol{\mu}^{(n)}(A_n)$$

pour tout borélien A_n de Ω^n, et donc

$$\int_\Omega f_n d\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \to \int_\Omega f_n d\boldsymbol{\mu}^{(n)}$$

pour toute fonction f_n continue bornée de Ω^n dans $\mathbb{R}$. Modulo un argument d'extraction diagonale, on peut supposer que la convergence (2.8) a lieu le long de la même sous-suite pour tout $n \in \mathbb{N}$. En testant la convergence (2.8) sur un borélien $A_n = A_m \times \Omega^{m-n}$ pour $m \leq n$ on obtient la relation de consistance

$$\left(\boldsymbol{\mu}^{(n)}\right)^{(m)} = \boldsymbol{\mu}^{(m)}, \text{ pour tout } m \leq n \tag{2.9}$$

qui implique que la suite $(\boldsymbol{\mu}^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ décrit bien un système physique avec un nombre infini de particules. On peut ensuite voir (théorème d'extenstion de Kolmogorov) qu'il existe $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}(\Omega^{\mathbb{N}})$ telle que $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ soit la n-ième marginale de $\boldsymbol{\mu}$ (d'où la notation). Cette probabilité satisfait (2.4) et on peut donc lui appliquer le Théorème 2.1, ce qui donne

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes n} dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho) \text{ quand } N \to \infty \tag{2.10}$$

où $P_{\boldsymbol{\mu}} \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$, ce qui est une version affaiblie mais rigoureuse de (2.3). Autrement dit **étant donné un état classique à N particules, sa n-ième marginale peut-être approchée par une combinaison convexe d'états produits quand N est grand et n fixe.** On remarquera par ailleurs que la mesure $P_{\boldsymbol{\mu}}$ apparaissant dans (2.10) ne dépend pas de n.

Bien sûr il faut pouvoir d'abord utiliser un argument de compacité pour obtenir (2.8), ce qui est possible par exemple si Ω est compact (dans ce cas $\mathcal{P}(\Omega^n)$ est compact pour la convergence au sens des mesures (2.8)). Plus généralement si le problème physique auquel on s'intéresse comporte un mécanisme de confinement, on peut montrer que les marginales des états minimisant l'énergie libre forment des suites tendues, et en déduire (2.8).

[12]On notera cette convergence $\rightharpoonup_*$ pour la distinguer d'une convergence en norme.

Quant à la preuve du Théorème 2.1, il y a plusieurs approches possibles. Mentionnons tout de suite que l'unicité est une conséquence assez simple d'un argument de densité dans $C_b(\mathcal{P}(\Omega))$, les fonctions continues bornées [13] de $\mathcal{P}(\Omega)$. L'argument semble n'avoir été formulé que récemment[14] par Pierre-Louis Lions [122].

Preuve du Théorème 2.1, Unicité. On vérifie aisément que les monômes de la forme

$$C_b(\mathcal{P}(\Omega)) \ni M_{k,\phi}(\rho) := \int \phi(x_1,\dots,x_k) d\rho^{\otimes k}(x_1,\dots,x_k), k \in \mathbb{N}, \phi \in C_b(\Omega^k) \qquad (2.11)$$

génèrent une sous-algèbre de $C_b(\mathcal{P}(\Omega))$, l'espace des fonctions continues bornées sur $\mathcal{P}(\Omega)$, voir Section 1.7.3 dans [73]. Le point à noter est que pour tout $\mu \in \mathcal{P}(\Omega)$

$$M_{k,\phi}(\mu) M_{\ell,\psi}(\mu) = M_{k+\ell,\phi\otimes\psi}(\mu).$$

Le fait que cette sous-algèbre soit dense est une conséquence du théorème de Stone-Weierstrass.

Il suffit donc de vérifier que si il existe deux mesures $P_{\boldsymbol{\mu}}$ et $P'_{\boldsymbol{\mu}}$ satisfaisant (2.5), alors

$$\int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)} M_{k,\phi}(\rho) dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho) = \int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)} M_{k,\phi}(\rho) dP'_{\boldsymbol{\mu}}(\rho)$$

pour tout $k \in \mathbb{N}$ et $\phi \in C_b(\mathcal{P}(\Omega^k))$. Mais cette dernière égalité signifie simplement

$$\int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)} \left(\int_{\Omega^k} \phi(x_1,\dots,x_k) d\rho^{\otimes k}(x_1,\dots,x_k) \right) dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho)$$
$$= \int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)} \left(\int_{\Omega^k} \phi(x_1,\dots,x_k) d\rho^{\otimes k}(x_1,\dots,x_k) \right) dP'_{\boldsymbol{\mu}}(\rho)$$

ce qui est évident puisque les deux expressions sont égales à

$$\int_{\Omega^k} \phi(x_1,\dots,x_k) d\boldsymbol{\mu}^{(k)}(x_1,\dots,x_k)$$

par hypothèse. □

Pour l'existence de la mesure, le point le plus remarquable, nous mentionnerons trois approches possibles:

- La preuve originelle de Hewitt-Savage est un argument géométrique : l'ensemble des probabilités symétriques sur $\Omega^{\mathbb{N}}$ est bien évidemment convexe. Le théorème de Choquet indique que tout point d'un convexe est une combinaison convexe des points extrêmaux de l'ensemble. Il suffit donc de montrer que les points extrêmes de $\mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$ sont exactement les mesures produit, correspondant aux suites de marginales $(\rho^{\otimes n})_{n\in\mathbb{N}}$. Cette approche est hautement non constructive, et la preuve que les suites $(\rho^{\otimes n})_{n\in\mathcal{N}}$ sont les points extrêmes de $\mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$ est un argument par contradiction.
- Une approche entièrement constructive est due à Diaconis et Freedman [50]. Dans cet argument probabiliste, le Théorème 2.1 devient un corollaire d'un résultat d'approximation à N fini, donnant une version quantitative de (2.10).

[13] Pour simplifier on peut penser au cas où Ω est compact, auquel cas on remplace $C_b(\mathcal{P}(\Omega))$ par les fonctions continues.

[14] Les cours de Pierre-Louis Lions sont disponibles en vidéo sur le site du Collège de France.

- Pierre-Louis Lions a développé une approche nouvelle de la théorie dans le cadre de sa théorie des jeux de champ moyen [122]. Il s'agit d'un point de vue dual, où l'on commence par s'intéresser au concept de "fonctions continues dépendant faiblement d'un grand nombre de variables". On pourra en trouver un résumé dans les notes de cours de François Golse [73], Section 1.7.3.

Il se trouve que la preuve du théorème de Hewitt-Savage suivant le point de vue de Lions est en grande partie une redécouverte de la méthode de Diaconis et Freedman. Dans la suite nous suivrons un mélange des deux approches, des compléments pouvant être trouvés dans [79, Section 5].

2.2. **Théorème de Diaconis-Freedman.**

Comme nous venons de l'annoncer, il est en fait possible de donner une version quantitative de l'approximation (2.10) qui implique le Théorème 2.1. Outre son intérêt intrinsèque, ce résultat mène naturellement à une preuve constructive qui me semble être de loin la plus concrète qui existe dans la littérature. L'approximation se fera dans la norme naturelle pour les mesures de probabilité sur un ensemble S, la variation totale:

$$\|\mu\|_{\mathrm{TV}} = \int_S d|\mu| = \sup_{\phi \in C_b(S)} \left| \int_\Omega \phi \, d\mu \right| \tag{2.12}$$

qui coïncide avec la norme L^1 pour des mesures absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgues. Le résultat que nous allons démontrer, issu de [50], est le suivant:

Théorème 2.2 (Diaconis-Freedman)**.**
Soit $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\Omega^N)$ une mesure de probabilité symétrique. Il existe $P_{\boldsymbol{\mu}_N} \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ tel que, avec

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N := \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes N} dP_{\boldsymbol{\mu}_N}(\rho) \tag{2.13}$$

on ait

$$\left\| \boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)} \right\|_{\mathrm{TV}} \leq 2\frac{n(n-1)}{N}. \tag{2.14}$$

De plus, $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N$ est entièrement caractérisée par ses marginales :

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{N^n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{1 \leq i_1 \neq \dots \neq i_j \leq N} \boldsymbol{\mu}_N^{(j)}(x_{i_1}, \dots, x_{i_j}) \, \delta_{x_{i_{j+1}} = \dots = x_{i_n}} \tag{2.15}$$

où Σ_j est le groupe des permutations de j éléments.

Preuve du Théorème 2.2. On fera un léger abus de notation en écrivant $\boldsymbol{\mu}_N(Z)dZ$ au lieu de $d\boldsymbol{\mu}_N(Z)$ pour les intégrales en $(z_1, \dots, z_N) = Z \in \Omega^N$. En tout état de cause, il est déjà suffisament instructif de considérer une mesure absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgues.

La symétrie de $\boldsymbol{\mu}_N$ implique, pour $X = (x_1, \dots, x_N) \in \Omega^N$

$$\boldsymbol{\mu}_N(X) = \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N(Z) \sum_{\sigma \in \Sigma_N} (N!)^{-1} \delta_{Z_\sigma = X} dZ \tag{2.16}$$

où Z_σ représente le N-uplet $(z_{\sigma(1)}, \ldots, z_{\sigma(n)})$. On définit

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N(X) = \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N(Z) \sum_{\gamma \in \Gamma_N} N^{-N} \delta_{Z_\gamma = X} dZ, \tag{2.17}$$

où Γ_N est l'ensemble de toutes les applications de $\{1, \ldots, N\}$ dans lui-même et Z_γ est défini de la même manière que Z_σ. En remarquant que

$$\sum_{\gamma \in \Gamma_N} N^{-N} \delta_{Z_\gamma = X} = \left(N^{-1} \sum_{j=1}^{N} \delta_{z_j} \right)^{\otimes N} (x_1, \ldots, x_N), \tag{2.18}$$

on peut mettre (2.17) sous la forme (2.13) en prenant

$$P_{\boldsymbol{\mu}_N}(\rho) = \int_{\Omega^N} \delta_{\rho = \bar{\rho}_Z} \boldsymbol{\mu}_N(Z) dZ, \quad \bar{\rho}_Z(x) := \sum_{i=1}^{N} N^{-1} \delta_{z_j = x}, \tag{2.19}$$

et on remarquera au passage $P_{\boldsymbol{\mu}_N}$ ne charge que des mesures empiriques. Il s'agit maintenant de calculer la différence entre les marginales de $\boldsymbol{\mu}_N$ et $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N$. Diaconis et Freedman procèdent comme suit: Bien sûr

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)} = \int_{\Omega^N} \left(\left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} (N!)^{-1} \delta_{Z_\sigma = X} \right)^{(n)} - \left(\sum_{\gamma \in \Gamma_N} N^{-N} \delta_{Z_\gamma = X} \right)^{(n)} \right) \boldsymbol{\mu}_N(Z) dZ,$$

mais

$$\left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} (N!)^{-1} \delta_{Z_\sigma = X} \right)^{(n)}$$

est la loi de probabilité pour tirer n boules au hasard d'une urne en contenant N [15], *sans* remplacement alors que

$$\left(\sum_{\gamma \in \Gamma_N} N^{-N} \delta_{Z_\gamma = X} \right)^{(n)}$$

est la loi de probabilité pour tirer n boules au hasard d'une urne en contenant N, *avec* remplacement. Intuitivement il est clair que quand n est petit devant N, le fait que l'on remplace ou pas les boules après chaque tirage n'affecte pas significativement le résultat. Il n'est pas difficile d'obtenir des bornes quantitatives qui mènent au résultat (2.14), voir par exemple [68].

[15] Les boules sont étiquetées $x_1, \ldots, x_N$.

L'expression explicite (2.15), n'est pas mentionnée dans [50] mais c'est une conséquence directe de la définition (2.18): par symétrie on a

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(1)}(x) = N^{-1}\sum_{j=1}^N \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N(Z)\delta_{z_j=x}dZ = \boldsymbol{\mu}_N^{(1)}(x)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(2)}(x_1,x_2) &= N^{-2}\int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N(Z)\left(\sum_{j=1}^N \delta_{z_j=x_1}\right)\left(\sum_{j=1}^N \delta_{z_j=x_2}\right)dZ \\ &= N^{-2}\sum_{1\leq i\neq j\leq N}\int_{\Omega^N}\boldsymbol{\mu}_N(Z)\delta_{z_i=x_1}\delta_{z_j=x_2}dZ + N^{-2}\sum_{i=1}^N\int_{\Omega^N}\boldsymbol{\mu}_N(Z)\delta_{z_i=x_1}\delta_{z_i=x_2}dZ \\ &= \frac{N-1}{N}\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x_1,x_2) + \frac{1}{N}\boldsymbol{\mu}_N^{(1)}(x_1)\delta_{x_1=x_2}. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Nous omettrons le calcul des marginales supérieures, qui suit les mêmes lignes. Remarquons que (2.14) se déduit également de (2.15). Pour voir cela il suffit de calculer le terme $j=n$ dans la somme: par symétrie de $\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}$ on a

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)} = \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n}\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} + \nu_n$$

où ν_n est une mesure positive sur Ω^n. On a alors

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)} = \left(1 - \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n}\right)\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \nu_n \tag{2.21}$$

et comme les deux mesures du membre de gauche sont des probabilités on déduit

$$\int_{\Omega^n} d\nu_n = \left(1 - \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n}\right).$$

En outre, puisque le premier terme du membre de droite de (2.21) est positif et le deuxième négatif on a par l'inégalité triangulaire

$$\begin{aligned}\int_{\Omega^n} d\left|\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)}\right| &\leq \left(1 - \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n}\right) + \int_{\Omega^n} d\nu_n \\ &= 2\left(1 - \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n}\right).\end{aligned}$$

Il est ensuite facile de voir que

$$\begin{aligned}\frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{N^n} = \prod_{j=1}^n \frac{N-j+1}{N} &= \prod_{j=1}^n\left(1-\frac{j-1}{N}\right) \\ &\geq \left(1-\frac{n-1}{N}\right)^n \geq 1 - \frac{n(n-1)}{N}\end{aligned}$$

ce qui prouve (2.14) avec $C=2$. Une meilleure constante $C=1$ peut être obtenue, voir [50, 68]. □

En corollaire de la construction de Diaconis et Freedman nous obtenons une preuve simple de la partie existence du théorème de Hewitt-Savage:

Preuve du Théorème 2.1, Existence. Commençons par le cas où Ω est compact. On applique le Théorème 2.2 à $\boldsymbol{\mu}^{(N)}$ qui est une probabilité symétrique sur Ω^N, et on obtient donc

$$\left\| \boldsymbol{\mu}^{(n)} - \int_{\rho \in \mathcal{P}(\Omega)} \rho^{\otimes n} dP_N(\rho) \right\|_{\mathrm{TV}} \leq C \frac{n^2}{N} \tag{2.22}$$

pour une certaine mesure $P_N \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$. Lorsque Ω est compact, $\mathcal{P}(\Omega)$ et $\mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ le sont également. On peut donc (modulo une sous-suite) supposer que

$$P_N \to P \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$$

au sens des mesures et il ne reste qu'à passer à la limite $N \to \infty$ à n fixé dans (2.22).

Pour le cas où Ω n'est pas compact, on emprunte une idée à la preuve d'existence selon Pierre-Louis Lions [122] (voir aussi [73]). Il s'agit de montrer que la mesure P_N obtenue en appliquant le théorème de Diaconis-Freedman à $\boldsymbol{\mu}^{(N)}$ converge. Il suffit pour cela de la tester sur un monôme de la forme (2.11):

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))} M_{k,\phi}(\mu) dP_N(\mu) &= \int_{Z \in \Omega^N} M_{k,\phi} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta_{z_j} \right) d\boldsymbol{\mu}^{(N)}(Z) \\
&= \int_{Z \in \Omega^N} \int_{X \in \Omega^k} \phi(x_1, \dots, x_k) \prod_{j=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta_{z_j = x_k} \right) d\boldsymbol{\mu}^{(N)}(Z) \\
&= \int_{Z \in \Omega^k} \phi(z_1, \dots, z_k) d\boldsymbol{\mu}^{(k)}(Z) + O(N^{-1})
\end{aligned} \tag{2.23}$$

par un calcul similaire à celui donnant (2.15). La limite (2.23) existe donc pour tout monôme $M_{k,\phi}$, et par densité des monômes pour toute fonction continue bornée sur $\mathcal{P}(\Omega)$. On déduit ainsi

$$P_N \rightharpoonup_* P$$

et on peut conclure comme précédemment. □

Quelque petites remarques avant de passer aux applications des Théorèmes 2.1 et 2.2:

Remarque 2.3 (Sur la construction de Diaconis-Freedman-Lions).

(1) On notera d'abord que la mesure définie par (2.19) est celle que Lions utilise dans son approche du théorème de Hewitt-Savage. C'est la manière canonique de construire une mesure sur $\mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ étant donnée une mesure sur $\mathcal{P}_s(\Omega^N)$, en passant par les mesures empiriques. Le passage à la limite (2.23) peut remplacer l'estimation explicite (2.14) si on s'intéresse uniquement à la preuve du Théorème 2.1.
(2) Le fait d'avoir une estimation explicite de la forme (2.14) est évidemment très satisfaisant et peut s'avérer utile dans les applications. On peut se demander si le taux de convergence obtenu est optimal. De manière peut-être surprenante c'est en fait le cas. On aurait pu s'attendre à une approximation utile pour $n \ll N$, mais il se trouve que $\sqrt{n} \ll N$ est optimal, voir les exemples de [50].
(3) Les formules simples (2.20) sont bien utiles en pratique. Il est assez satisfaisant que $\boldsymbol{\mu}_N^{(1)} = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(1)}$ et que $\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}$ puisse se reconstruire en utilisant seulement $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(2)}$ et $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(1)}$.

(4) La construction paye sa généralité par un comportement en réalité très mauvais dans de nombreux cas. Remarquons que (2.19) ne charge que des mesures empiriques, qui ont toutes une entropie infinie. Cela pose des problèmes pour employer le Théorème 2.2 à l'étude d'une énergie libre à température positive. En outre, pour un problème avec interactions répulsives fortes, on cherchera à appliquer la construction à une mesure satisfaisant $\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,x) \equiv 0$ (probabilité nulle d'avoir deux particules au même endroit). Dans ce cas $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(2)}(x,x) = N^{-1}\boldsymbol{\mu}_N^{(1)}(x)$ est non nulle et donc l'énergie de $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N$ sera infinie si le potentiel d'interactions comporte une singularité à l'origine.

(5) Il serait très intéressant de disposer d'une construction qui satisfasse une estimation de forme (2.14) tout en évitant les inconvénients mentionnés ci-dessus. Par exemple, est-il possible de garantir $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N \in L^1(\Omega^N)$ si $\boldsymbol{\mu}_N \in L^1(\Omega^N)$? On pourrait aussi demander que la construction laisse les mesures produits $\rho^{\otimes N}$ invariantes, ce qui n'est pas du tout le cas de (2.15).

(6) Si l'espace Ω est remplacé par un ensemble fini, disons $\Omega = \{1, \dots, d\}$, on peut obtenir une erreur proportionnelle à dn/N au lieu de n^2/N en utilisant la preuve originelle de Diaconis-Freedman. On peut donc remplacer (2.14) par

$$\left\| \boldsymbol{\mu}_N^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(n)} \right\|_{\mathrm{TV}} \leq \frac{C}{N} \min\left(dn, n^2\right). \tag{2.24}$$

Nous ne nous servirons pas de ce point dans la suite. □

2.3. **Limite de champ moyen pour une énergie libre classique.**

Dans cette section nous appliquons le Théorème 2.1 à une fonctionnelle d'énergie libre à température positive, suivant [125, 25, 85, 87]. On considère un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ et la fonctionnelle

$$\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}] = \int_{X\in\Omega^N} H_N(X)\boldsymbol{\mu}(X)dX + T\int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}(X)\log\boldsymbol{\mu}(X)dX \tag{2.25}$$

définie pour toute mesure de probabilité $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}(\Omega^N)$. Ici la temprérature T est fixe dans la limite $N \to \infty$ et le Hamiltonien H_N est choisi de type champ-moyen:

$$H_N(X) = \sum_{j=1}^N V(x_j) + \frac{1}{N-1}\sum_{1\leq i<j\leq N} w(x_i - x_j). \tag{2.26}$$

Ici V est un potentiel semi-continu inférieurement. Pour se placer dans un cadre compact, on supposera que soit Ω est borné soit

$$V(x) \to \infty \text{ quand } |x| \to \infty. \tag{2.27}$$

Le potentiel d'interaction w sera borné inférieurement et semi-continu inférieurement. Pour rester concret on pourra penser à $w \in L^\infty$, ou bien à un potentiel de type Coulomb répulsif :

$$w(x) = \frac{1}{|x|^{d-2}} \text{ si } d = 3 \tag{2.28}$$

$$w(x) = -\log|x| \text{ si } d = 2 \tag{2.29}$$

$$w(x) = -|x| \text{ si } d = 1, \tag{2.30}$$

omniprésent dans les applications. On supposera également toujours

$$w(x) = w(-x)$$

et si le domaine n'est pas borné on supposera en outre

$$w(x-y)+V(x)+V(y) \to \infty \text{ quand } |x| \to \infty \text{ ou } |y| \to \infty \text{ et est semi-continu inférieurement.} \tag{2.31}$$

Nous nous intéressons à la limite de la mesure de Gibbs minimisant (2.25) dans $\mathcal{P}_s(\Omega^N)$:

$$\boldsymbol{\mu}_N(X) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \exp\left(-\frac{1}{T} H_N(X)\right) dX \tag{2.32}$$

et à l'énergie libre correspondante

$$F_N = \inf_{\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}(\Omega_s^N)} \mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}] = \mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}_N] = -T \log \mathcal{Z}_N. \tag{2.33}$$

La fonctionnelle d'énergie libre se réécrit

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}] &= N \int_\Omega V(x) d\boldsymbol{\mu}^{(1)}(x) + \frac{N}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y) + T \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu} \log \boldsymbol{\mu} \\ &= \frac{N}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} \left(w(x-y) + V(x) + V(y)\right) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y) + T \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu} \log \boldsymbol{\mu}. \end{aligned} \tag{2.34}$$

en utilisant les marginales

$$\boldsymbol{\mu}^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \int_{x_{n+1},\dots,x_N \in \Omega} d\boldsymbol{\mu}(x_1, \dots, x_N). \tag{2.35}$$

En insérant un ansatz de forme

$$\boldsymbol{\mu} = \rho^{\otimes N}, \rho \in \mathcal{P}(\Omega) \tag{2.36}$$

dans (2.25) on obtient la fonctionnelle de champ moyen

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{\mathrm{MF}}[\rho] &:= N^{-1} \mathcal{F}_N[\rho^{\otimes N}] \\ &= \int_\Omega V(x) d\rho(x) + \frac{1}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} w(x-y) d\rho(x) d\rho(y) + T \int_\Omega \rho \log \rho \end{aligned} \tag{2.37}$$

dont on notera F^{MF} et ϱ^{MF} le minimum et un minimiseur parmi les mesures de probabilité. Notre but est de justifier l'approximation de champ moyen en démontrant le théorème suivant

Théorème 2.4 (Limite de champ moyen classique à température fixe).
On a

$$\frac{F_N}{N} \to F^{\mathrm{MF}} \text{ quand } N \to \infty. \tag{2.38}$$

De plus à extraction d'une sous-suite près, on a pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \int_{\rho \in \mathcal{M}^{\mathrm{MF}}} \rho^{\otimes n} dP(\rho). \tag{2.39}$$

au sens des mesures, où P est une mesure de probabilité sur $\mathcal{M}^{\mathrm{MF}}$, l'ensemble des minimiseurs de $\mathcal{F}^{\mathrm{MF}}$.

En particulier, si $\mathcal{F}^{\rm MF}$ a un minimiseur unique on obtient

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \left(\varrho^{\rm MF}\right)^{\otimes n}$$

Preuve du Théorème 2.4. On suit essentiellement [125, 25, 84, 85]. Une borne supérieure sur l'énergie libre s'obtient aisément en prenant une fonction test de forme $\rho^{\otimes N}$ et on déduit

$$\frac{F_N}{N} \leq F^{\rm MF}. \tag{2.40}$$

Seule la borne inférieure correspondante demande du travail. On commence par extraire une sous-suite le long de laquelle

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \boldsymbol{\mu}^{(n)} \tag{2.41}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$, avec $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\Omega^{\mathbb{N}})$. On procède comme indiqué Section 2.1, en utilisant soit le fait que Ω est compact soit l'hypothèse (2.31) qui implique que la suite est tendue.

Par semi-continuité inférieure on a immédiatement

$$\begin{aligned}\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} (w(x-y)+V(x)+V(y))\, d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y) \\ \geq \frac{1}{2} \iint_{\Omega\times\Omega} (w(x-y)+V(x)+V(y))\, d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y).\end{aligned} \tag{2.42}$$

Pour le terme d'entropie on utilise la propriété de sous-additivité (conséquence de l'inégalité de Jensen, voir [137] ou les références citées précédemment)

$$\int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N \log \boldsymbol{\mu}_N \geq \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor \int_{\Omega^n} \boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \log \boldsymbol{\mu}_N^{(n)} + \int_{\Omega^{N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor}} \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} \log \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)}$$

où $\lfloor\, .\, \rfloor$ dénote la partie entière. L'inégalité de Jensen implique que pour toutes mesures de probabilités μ et ν, l'entropie relative de μ par rapport à ν est positive:

$$\int \mu \log \frac{\mu}{\nu} = \int \nu \frac{\mu}{\nu} \log \frac{\mu}{\nu} \geq \left(\int \nu \frac{\mu}{\nu}\right) \log \left(\int \nu \frac{\mu}{\nu}\right) = 0.$$

On en déduit que pour tout $\nu_0 \in \mathcal{P}(\Omega)$

$$\begin{aligned}\int_{\Omega^{N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor}} \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} \log \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} &= \int_{\Omega^{N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor}} \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} \log \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)}}{\nu_0^{\otimes\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)}} \right) \\ &\quad + \int_{\Omega^{N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor}} \boldsymbol{\mu}_N^{\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} \log \nu_0^{\otimes\left(N-n\lfloor \frac{n}{N}\rfloor\right)} \\ &\geq \left(N - n\left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor\right) \int_\Omega \boldsymbol{\mu}_N^{(1)} \log \nu_0.\end{aligned}$$

En choisissant $\nu_0 \in \mathcal{P}(\Omega)$ de la forme $\nu_0 = c_0 \exp(-c_1 V)$ il n'est pas difficile de voir que la dernière intégrale est bornée inférieurement indépendamment de N et on obtient alors pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}_N \log \boldsymbol{\mu}_N \geq \frac{1}{n} \int_{\Omega^n} \boldsymbol{\mu}^{(n)} \log \boldsymbol{\mu}^{(n)} \tag{2.43}$$

* par semi-continuité inférieure de (moins) l'entropie.

En rassemblant (2.42) et (2.43) on obtient une borne inférieure en terme d'une fonctionnelle de $\boldsymbol{\mu}$:

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N}\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}_N] \geq \mathcal{F}[\boldsymbol{\mu}] := \frac{1}{2}\iint_{\Omega\times\Omega} (w(x-y)+V(x)+V(y))\, d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y) + T\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n}\int_{\Omega^n} \boldsymbol{\mu}^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}^{(n)}. \quad (2.44)$$

Le second terme est souvent appelé (moins) l'entropie moyenne de $\boldsymbol{\mu}\in\mathcal{P}(\Omega^{\mathbb{N}})$. Il s'agit maintenant d'appliquer le théorème de Hewitt-Savage à $\boldsymbol{\mu}$. Le premier terme de $\mathcal{F}$ est évidemment affine en fonction de $\boldsymbol{\mu}^{(2)}$, ce qui est parfait pour utiliser (2.6), mais on pourrait s'inquiéter à la vue du second terme qui semble plutôt convexe. En fait un argument simple de [137] montre que cette entropie moyenne est bien affine: étant donné $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2\in\mathcal{P}(\Omega^{\mathbb{N}})$ on utilise d'une part la convexité de $x\mapsto x\log x$ et d'autre part la croissance de $x\mapsto\log x$ pour obtenir

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_2^{(n)} &\geq \int_{\Omega^n}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\right)\log\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\right)\\ &\geq \frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\\ &\quad-\frac{\log(2)}{2}\left(\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\right)\\ &= \frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_1^{(n)}+\frac{1}{2}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}_2^{(n)}-\log(2).\end{aligned}$$

En divisant par n et passant à la limite supérieure on déduit que

$$\mathcal{P}_s(\Omega^n)\ni\boldsymbol{\mu}\mapsto\limsup_{n\to\infty}\frac{1}{n}\int_{\Omega^n}\boldsymbol{\mu}^{(n)}\log\boldsymbol{\mu}^{(n)}$$

est bien affine linéare et donc que $\mathcal{F}[\mu]$ l'est également. Il reste à utiliser (2.6), ce qui donne une probabilité $P_{\boldsymbol{\mu}}\in\mathcal{P}(\mathcal{P}(\Omega))$ telle que

$$\begin{aligned}\liminf_{N\to\infty}\frac{1}{N}\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}_N] &\geq \int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)}\mathcal{F}[\rho^{\otimes\infty}]dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho)\\ &= \int_{\rho\in\mathcal{P}(\Omega)}\mathcal{F}^{\mathrm{MF}}[\rho]dP_{\boldsymbol{\mu}}(\rho)\geq F^{\mathrm{MF}}.\end{aligned}$$

Ici on a noté $\rho^{\otimes\infty}$ la probabilité sur $\mathcal{P}(\Omega^{\mathbb{N}})$ qui a pour n-ième marginale $\rho^{\otimes n}$ pour tout n et on a utilisé le fait que $P_{\boldsymbol{\mu}}$ est d'intégrale 1. Ceci conclut la preuve de (2.38) et (2.39) se déduit facilement des arguments précédents. □

2.4. **Estimations quantitatives dans la limite champ moyen/température faible.**

Ici nous allons donner un exemple où les précisions apprortées au théorème de Hewitt-Savage par la méthode de Diaconis-Freedman se révèlent utiles. Comme mentionné à la Remarque 2.3, la construction de la Section 2.2 se comporte assez mal vis-à-vis de l'entropie, mais il existe un certain nombre de problèmes intéressants où il fait sens de considérer une température petite dans la limite $N\to\infty$, auquel cas l'entropie joue un faible rôle.

Un exemple central est celui des systèmes de type "log-gas". Il est bien connu que la distribution des valeurs propres de certains ensembles de matrices aléatoires est donné par la mesure de Gibbs d'un gaz classique avec interactions logarithmiques. De plus, il se trouve que la limite pertinente pour de grandes matrices est un régime de champ-moyen avec température d'ordre N^{-1}. Considérons le Hamiltonien suivant (les hypothèses sur V sont les mêmes que précédemment, avec $w = -\log|\,.\,|$):

$$H_N(X) = \sum_{j=1}^{N} V(x_j) - \frac{1}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq N} \log|x_i - x_j| \tag{2.45}$$

où $X = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{dN}$. La mesure de Gibbs correspondante

$$\boldsymbol{\mu}_N(X) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \exp\left(-\beta N H_N(X)\right) dX \tag{2.46}$$

correspond (modulo un changement d'échelle dépendant de β) à la distribution des valeurs propres d'une matrice aléatoire dans les cas suivants:

- $d = 1, \beta = 1, 2, 4$ et $V(x) = \frac{|x|^2}{2}$. On obtient respectivement les matrices gaussiennes réelles symétriques, complexes hermitiennes, et quatertioniques auto-duales.
- $d = 2, \beta = 2$ et $V(x) = \frac{|x|^2}{2}$. On obtient alors les matrices gaussiennes complexes sans condition de symétrie, c'est-à-dire l'ensemble dit de Ginibre [70].

Dans le cadre de ces notes nous ne donnerons pas plus de précisions sur l'aspect "matrices aléatoires", et nous nous contenterons de prendre les faits précédents comme une motivation suffisante pour étudier la limite $N \to \infty$ des mesures (2.46) avec β fixé, ce qui correspond (comparer avec (2.32)) à prendre $T = \beta^{-1}N^{-1}$, soit une température très petite. Pour une introduction aux matrices aléatoires et aux log-gas nous renvoyons à (parmi de nombreuses sources) [7, 66, 124]. Pour des études poussées des mesures (2.46) selon des méthodes assez différentes de celles présentées ici on pourra consulter entre autres [10, 11, 21, 17, 18, 27, 141, 145, 146].

Dans le cas $d = 2$, les mesures de forme (2.46) ont aussi une application naturelle à l'étude de certaines fonctions d'onde quantique apparaissant dans le cadre de l'effet Hall fractionnaire (voir [142, 143, 144] et les références citées). Là aussi il fait sens de considérer β comme étant fixe.

La singularité en 0 du logarithme va poser des difficultés dans la preuve, comme indiqué à la Remarque 2.3, mais on peut les contourner relativement aisément, au contraire de celle liée à l'entropie. La méthode que nous présenterons n'est pas limitée au cas des log-gas et peut être réemployée dans des contextes variés.

A nouveau, (2.46) minimise une énergie libre

$$\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}] = \int_{X\in\Omega^N} H_N(X)\boldsymbol{\mu}(X)dX + \frac{1}{\beta N}\int_{\Omega^N} \boldsymbol{\mu}(X)\log\boldsymbol{\mu}(X)dX \tag{2.47}$$

dont nous noterons F_N le minimum. L'objet limite naturel est cette fois une énergie libre où le terme d'entropie est négligé[16]:

$$\mathcal{E}^{\mathrm{MF}}[\rho] := \int_{\mathbb{R}^d} V d\rho - \frac{1}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \log|x-y| d\rho(x) d\rho(y), \tag{2.48}$$

[16]Une énergie donc, d'où la notation.

obtenue en insérant l'ansatz $\rho^{\otimes N}$ dans (2.47) et négligeant le terme d'entropie qui est manifestement d'ordre inférieur pour β fixe. On notera E^{MF} et ϱ^{MF} respectivement l'énergie minimum et le minimiseur (unique dans ce cas par stricte convexité de la fonctionnelle). Il est bien connu (voir les références sus-citées et également [87]) que

$$N^{-1}F_N = -\beta\mathcal{Z}_N \to E^{\mathrm{MF}} \text{ quand } N \to \infty \tag{2.49}$$

et

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \left(\varrho^{\mathrm{MF}}\right)^{\otimes n}. \tag{2.50}$$

Nous allons reprouver (2.50) et donner une version quantitative de (2.49) en nous inspirant de [144]:

Théorème 2.5 (**Estimation de l'énergie libre d'un log-gas**)**.**
Pour tout $\beta \in \mathbb{R}$, on a

$$E^{\mathrm{MF}} - CN^{-1}\left(\beta^{-1} + \log N + 1\right) \leq -\beta\mathcal{Z}_N \leq E^{\mathrm{MF}} + C\beta^{-1}N^{-1}. \tag{2.51}$$

Des estimations fines de la fonction de partition $\mathcal{Z}_N$ d'un log-gas semblent n'être disponibles dans la littérature que depuis assez récemment [141, 145, 146]. Entre autres, les références précédentes indiquent que la correction à E^{MF} est exactement d'ordre $N^{-1}\log N$.

Preuve du Théorème 2.5. Nous n'élaborerons pas sur la borne supérieure, qui s'obtient en prenant l'ansatz factorisé habituel et en estimant son entropie. Pour la borne inférieure, nous allons utiliser le Théorème 2.2. Pour cela il nous faut d'abord borner crudement l'entropie: par positivé de l'entropie relative (inégalité de Jensen)

$$\int_{\mathbb{R}^{dN}} \boldsymbol{\mu}\log\frac{\boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{\nu}} \geq 0 \text{ pour tout } \boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu} \in \mathcal{P}(\Omega^N)$$

on peut écrire, en utilisant la mesure de probabilité

$$\boldsymbol{\nu}_N = \left(c_0 \exp\left(-V(|x|)\right)\right)^{\otimes N},$$

la borne inférieure suivante

$$\int_{\mathbb{R}^{dN}} \boldsymbol{\mu}_N \log \boldsymbol{\mu}_N \geq \int_{\mathbb{R}^{dN}} \boldsymbol{\mu}_N \log \boldsymbol{\nu}_N = -N\int_{\mathbb{R}^d} V d\boldsymbol{\mu}_N^{(1)} - N\log c_0. \tag{2.52}$$

Pour obtenir une borne inférieure sur l'énergie il nous faut d'abord régulariser le potentiel d'interaction: soit $\alpha > 0$ un petit paramètre que nous optimiserons plus tard et

$$-\log_\alpha|z| = \begin{cases} -\log\alpha + \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{|z|^2}{\alpha^2}\right) & \text{if } |z| \leq \alpha \\ -\log|z| & \text{if } |z| \geq \alpha. \end{cases} \tag{2.53}$$

Clairement $-\log_\alpha|z| \leq -\log|z|$ est régulier en 0. De plus, on a

$$-\frac{d}{d\alpha}\log_\alpha|z| = \begin{cases} -\dfrac{1}{\alpha} + \dfrac{|z|^2}{\alpha^3} & \text{if } |z| \leq \alpha \\ 0 & \text{if } |z| \geq \alpha. \end{cases} \tag{2.54}$$

On utilise la minoration $-\log_\alpha|z| \leq -\log|z|$ pour obtenir

$$\int_{X\in\Omega^N} H_N(X)\boldsymbol{\mu}(X)dX \geq N\int_{\mathbb{R}^d} V d\boldsymbol{\mu}_N^{(1)} - \frac{N}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \log_\alpha|x-y| d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y)$$

et nous sommes maintenant en position d'appliquer le Théorème 2.2, et plus précisément les formules explicites (2.20):

$$\int_{X\in\Omega^N} H_N(X)\boldsymbol{\mu}_N(X)dX \geq N\int_{\mathbb{R}^d} V d\tilde{\boldsymbol{\mu}}_N^{(1)} - \frac{N^2}{2(N-1)}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \log_\alpha|x-y| d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y) + C\log_\alpha(0) \tag{2.55}$$

et en combinant (2.52), (2.13) et en rappelant que la température est égale à $(\beta N)^{-1}$ on obtient

$$N^{-1}\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}_N] \geq \int_{\rho\in\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)} \mathcal{E}_\alpha^{\mathrm{MF}}[\rho] dP_{\boldsymbol{\mu}_N}(\rho) + CN^{-1}\left(\log_\alpha(0) - \beta\right) \geq E_\alpha^{\mathrm{MF}} - CN^{-1}\log(\alpha) - C\beta N^{-1} \tag{2.56}$$

où E_α^{MF} est le minimum (parmi les mesures de probabilité) de la fonctionnelle modifiée

$$\mathcal{E}_\alpha^{\mathrm{MF}}[\rho] := \int_{\mathbb{R}^d} V(1-\beta^{-1}N^{-1})d\rho - \frac{N}{2(N-1)}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d}\log_\alpha|x-y|d\rho(x)d\rho(y).$$

En exploitant l'équation variationnelle associée, (2.54) et le principe de Feynman-Hellmann, il n'est pas difficile de montrer que pour α assez petit

$$\left|E_\alpha^{\mathrm{MF}} - E^{\mathrm{MF}}\right| \leq C\alpha^d + CN^{-1}$$

et donc on conclut

$$N^{-1}\mathcal{F}_N[\boldsymbol{\mu}_N] \geq E^{\mathrm{MF}} - CN^{-1}\log(\alpha) - C\beta N^{-1} - CN^{-1} - C\alpha^d - C$$

ce qui donne la borne inférieure désirée en optimisant par rapport à α (prendre $\alpha = N^{-1/d}$). □

Remarque 2.6 (Extensions possibles).

(1) On peut également prouver des version quantitatives de (2.50) en suivant essentiellement la méthode de preuve ci-dessus. Nous n'élaborerons pas plus sur ce point pour lequel nous renvoyons à la méthode utilisée dans [144] (basée sur une implémentation quantitative du principe de Feynman-Hellmann).

(2) Un autre cas que nous pourrions traiter avec la méthode ci-dessus est celui des ensembles de matrices gaussiennes unitaires, orthogonaux et symplectiques introduits par Dyson [53, 54, 55]. Dans ce cas, $\mathbb{R}^d$ est remplacé par le cercle unité, $\beta = 1, 2, 4$, $V \equiv 0$ dans (2.45) et le terme d'interaction n'est pas divisé par $N-1$. La méthode s'applique malgré ce dernier fait car le rôle du facteur $(N-1)^{-1}$ est de rendre les deux termes de (2.45) du même ordre de grandeur. Quand $V \equiv 0$ et que les particules vivent sur un domaine fixe, on a pas ce souci et le problème limite reste bien défini. □

3. Théorème de de Finetti quantique et théorie de Hartree

Nous rentrons maintenant dans le coeur du sujet du cours, les limites de champ moyen pour de grands systèmes bosoniques. Nous présenterons d'abord la dérivation du fondamental de la théorie de Hartree pour des particules confinées. Dans un tel cas, correspondant par exemple à des particules vivant dans un domaine borné, le résultat est alors une conséquence relativement immédiate du théorème de de Finetti prouvé par Størmer et Hudson-Moody [164, 82] qui décrit toutes les limites *fortes* (au sens de la norme $\mathfrak{S}^1$) des matrices de densité d'un grand système bosonique.

Nous passerons ensuite au cas plus complexe de systèmes non confinés. Le cas général sera traité plus tard et dans cette section nous supposerons que le potentiel d'interaction n'a pas d'états liés (un exemple est un potentiel purement répulsif). Il est alors suffisant de disposer d'un théorème à la de Finetti décrivant toutes les limites *faibles* (au sens de la topologie faible-$*$ sur $\mathfrak{S}^1$) des matrices densités d'un grand système bosonique.

Le théorème de de Finetti quantique Finetti faible (introduit dans [96]) implique le théorème de de Finetti quantique fort et il se trouve que les deux résultats peuvent se déduire d'un théorème encore plus général apparaissant dans [164, 82]. Le parti-pris de ces notes est de ne pas suivre cette approche, mais plutôt celle (par ailleurs plus constructive) de [96]. Ceci sera discuté plus en détail à la Section 3.3 qui annonce aussi la démarche qui nous guidera dans les chapitres suivants.

Pour simplifier l'exposition, on se concentrera sur le cas de particules quantiques non relativistes, en l'absence de champ magnétique, pour lesquelles le Hamiltonien a la forme générale

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} T_j + \frac{1}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq N} w(x_i - x_j), \tag{3.1}$$

agissant sur l'espace de Hilbert $\mathfrak{H}_s^N = \bigotimes_s^N \mathfrak{H}$, i.e. le produit tensoriel symétrique de N copies de $\mathfrak{H}$ où $\mathfrak{H}$ sera l'espace $L^2(\Omega)$ pour $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. L'opérateur T est un opérateur de Schrödinger

$$T = -\Delta + V \tag{3.2}$$

avec $V : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ et T_j est défini comme agissant sur la j-ème variable:

$$T_j \psi_1 \otimes \ldots \otimes \psi_N = \psi_1 \otimes \ldots \otimes T_j \psi_j \otimes \ldots \otimes \psi_N.$$

On suppose que T est auto-adjoint et borné inférieurement, et que le potentiel d'interaction $w : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ est relativement borné par rapport à T:

$$-\beta_-(T_1 + T_2) - C \leq w(x_1 - x_2) \leq \beta_+(T_1 + T_2) + C, \tag{3.3}$$

symétrique

$$w(-x) = w(x),$$

et décroissant à l'infini

$$w \in L^p(\Omega) + L^\infty(\Omega), \max(1, d/2) < p < \infty \to 0, w(x) \to 0 \text{ quand } |x| \to \infty. \tag{3.4}$$

Ceci assure que H_N est auto-adjoint et borné inférieurement. On fera un abus de notation en notant w l'opérateur de multiplication par $w(x_1 - x_2)$ sur $L^2(\Omega)$.

Notre but est de décrire le fondamental de (3.1), c'est-à-dire l'état réalisant[17]

$$E(N) = \inf \sigma_{\mathfrak{H}^N} H_N = \inf_{\Psi \in \mathfrak{H}^N, \|\Psi\|=1} \langle \Psi, H_N \Psi \rangle_{\mathfrak{H}^N}. \tag{3.5}$$

Dans le régime de champ moyen qui nous occupe, on s'attend à ce qu'un fondamental satisfasse

$$\Psi_N \approx u^{\otimes N} \text{ quand } N \to \infty \tag{3.6}$$

en un sens à préciser, ce qui mène naturellement à la fonctionnelle de Hartree

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] &= N^{-1} \left\langle u^{\otimes N}, H_N u^{\otimes N} \right\rangle_{\mathfrak{H}^N} = \langle u, Tu \rangle_{\mathfrak{H}} + \frac{1}{2} \langle u \otimes u, w\, u \otimes u \rangle_{\mathfrak{H}^2_s} \\ &= \int_\Omega |\nabla u|^2 + V|u|^2 + \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} |u(x)|^2 w(x-y) |u(y)|^2 dxdy. \end{aligned} \tag{3.7}$$

On notera e_{H} et u_{H} le minimum et un minimiseur de $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$ respectivement. On a bien sûr, par le principe variationnel

$$\frac{E(N)}{N} \leq e_{\mathrm{H}} \tag{3.8}$$

et on s'attend à pouvoir démontrer la borne inférieure correspondante pour obtenir

$$\frac{E(N)}{N} \to e_{\mathrm{H}} \text{ quand } N \to \infty. \tag{3.9}$$

Remarque 3.1 (Généralisations).
Toutes les idées principales peuvent être introduites dans le cadre précédent et nous renvoyons à [96] pour une discussion des généralisations possibles. On pourra même penser au cas où V et w sont tous deux réguliers à support compact si on désire comprendre la méthode dans le cas le plus simple possible.

Une généralisation très intéressante consiste en la substitution du Laplacien dans (3.2) par un opérateur d'énergie cinétique relativiste et/ou incluant un champ magnétique, comme décrit à la Section 1.2. Il faut alors adapter les hypothèses (3.3) et (3.4) mais le message reste le même: l'approche fonctionne tant que les modèles de départ et d'arrivée sont bien définis.

Une autre généralisation possible est l'inclusion d'interactions à plus de deux particules pour obtenir des fonctionnelles avec des non-linéarités d'ordre plus élevé à la limite. Il est bien sûr nécessaire de se placer dans une limite de champ moyen en ajoutant par exemple au Hamiltonien un potentiel de forme

$$\lambda_N \sum_{1 \leq i < j,k \leq N} w(x_i - x_j, x_i - x_k)$$

avec $\lambda_N \propto N^{-2}$ quand $N \to \infty$. Il est aussi possible de prendre en compte une interaction plus générale que la multiplication par un potentiel, sous des hypothèses du même genre que (3.3). □

[17] Le fondamental peut ne pas exister, auquel cas on pense à une suite d'états réalisant asymptotiquement l'infimum.

3.1. **Systèmes confinés et Théorème de de Finetti fort.**

Par "système confiné" on entend un cadre compact. On pourra choisir l'une des deux hypothèses suivantes:

$$\Omega \subset \mathbb{R}^d \text{ est un domaine borné et} \tag{3.10}$$

ou bien

$$\Omega = \mathbb{R}^d \text{ et } V(x) \to \infty \text{ quand } |x| \to \infty \tag{3.11}$$

avec V le potentiel apparaissant dans (3.2). On supposera en outre

$$V \in L^p_{\text{loc}}(\Omega), \max(1, d/2) < p \leq \infty.$$

Dans ces deux cas il est bien connu que

$$T = -\Delta + V \text{ est à résolvante compact} \tag{3.12}$$

ce qui permet d'obtenir très facilement de la convergence forte pour les matrices densité d'un fondamental de (3.1). On peut alors réellement penser à l'objet limite obtenu en prenant la limite $N \to \infty$ comme un état quantique à nombre infini de particules. En s'inspirant du cas classique discuté au Chapitre 2 la définition naturelle est la suivante:

Définition 3.2 (**Etat bosonique à nombre infini de particules**).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et pour $n \in \mathbb{N}$, $\mathfrak{H}^n_s$ l'espace bosonique à n particules correspondant. On appelle *état bosonique* à nombre infini de particules une suite $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ d'opérateurs à trace satisfaisant

- $\gamma^{(n)}$ est un état bosonique à n particules : $\gamma^{(n)} \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n_s)$ est auto-adjoint positif et

$$\text{Tr}_{\mathfrak{H}^n_s}[\gamma^{(n)}] = 1. \tag{3.13}$$

- la suite $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ est consistante:

$$\text{Tr}_{n+1}[\gamma^{(n+1)}] = \gamma^{(n)} \tag{3.14}$$

où Tr_{n+1} est la trace partielle par rapport à la dernière variable sur $\mathfrak{H}^{n+1}$.

□

La propriété clé ici est la consistance. C'est elle qui assure que la suite de matrices densités à n-particules $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ décrit bien un état physique. Notons que $\gamma^{(0)}$ est simplement un nombre réel et que la consistance assure que $\text{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)}] = 1$ pour tout n dès que $\gamma^{(0)} = 1$. Un cas particulier d'état symétrique est un état produit:

Définition 3.3 (**Etat produit à nombre infini de particules**).
On appelle *état produit* à nombre infini de particules une suite d'opérateurs à trace $\gamma^{(n)} \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n_s)$ avec

$$\gamma^{(n)} = \gamma^{\otimes n}, \tag{3.15}$$

pour tout $n \geq 0$ où γ est un état à une particule. Un état produit bosonique est nécessairement de la forme

$$\gamma^{(n)} = |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| = (|u\rangle\langle u|)^{\otimes n}, \tag{3.16}$$

avec $u \in S\mathfrak{H}$. □

Le fait que les états produits bosoniques soient tous de la forme (3.16) provient de l'observation que si $\gamma \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H})$ n'est pas pur (i.e. n'est pas un projecteur), $\gamma^{\otimes 2}$ ne peut pas avoir la symétrie bosonique, voir par exemple [82].

Le théorème de de Finetti fort est l'outil approprié pour décrire ces objets et spécifier le lien entre les deux définitions précédentes. Sous la forme que nous citons il s'agit d'un résultat de Hudson et Moody [82]:

Théorème 3.4 (De Finetti quantique fort).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ un état bosonique à nombre infini de particules sur $\mathfrak{H}$. Il existe une unique mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{P}(S\mathfrak{H})$ sur la sphère $S\mathfrak{H} = \{u \in \mathfrak{H}, \|u\| = 1\}$ de $\mathfrak{H}$, invariante par l'action[18] de S^1, telle que

$$\gamma^{(n)} = \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \, d\mu(u) \tag{3.17}$$

pour tout $n \geq 0$.

Autrement dit, **tout état bosonique à nombre infini de particules est une combinaison convexe d'états produits bosoniques**. Pour en déduire la validité de l'approximation de Hartree au niveau du fondamental de (3.1), il suffit alors de montrer que le problème limite est posé sur l'ensemble des états à nombre infini de particules, ce qui est relativement aisé dans un cadre compact. Nous allons prouver le résultat suivant

Théorème 3.5 (Dérivation de la théorie de Hartree pour des bosons confinés).
Sous les hypothèses précédentes, en particulier (3.10) *ou* (3.11)

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = e_{\rm H}.$$

Soit Ψ_N un fondamental de H_N réalisant l'infimum (3.5) *et*

$$\gamma_N^{(n)} := \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\right]$$

sa n-ième matrice de densité réduite. Il existe une mesure de proabilité μ sur $\mathcal{M}_{\rm H}$ l'ensemble des minimiseurs de $\mathcal{E}_{\rm H}$ (modulo une phase), telle que, le long d'une sous-suite et pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = \int_{\mathcal{M}_{\rm H}} d\mu(u) \; |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \tag{3.18}$$

fortement dans la norme de $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$. En particulier, si $e_{\rm H}$ a un minimiseur unique (modulo une phase constante), alors pour toute la suite

$$\lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = |u_{\rm H}^{\otimes n}\rangle\langle u_{\rm H}^{\otimes n}|. \tag{3.19}$$

Les idées de la preuve sont essentiellement contenues dans [63, 129, 134], appliquées à un contexte quelque peu différent. Nous suivrons les clarifications fournies par [96, Section 3].

[18] C'est-à-dire par la mutliplication par une phase constante $e^{i\theta}, \theta \in \mathbb{R}$.

Preuve du Théorème 3.5. Il nous faut prouver la borne inférieure correspondant à (3.8). Comme annoncé plusieurs fois on commence par écrire

$$\begin{aligned}\frac{E(N)}{N} &= \frac{1}{N}\left\langle \Psi_N, H_N \Psi_N \right\rangle_{\mathfrak{H}^N} = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^2}[w\gamma_N^{(2)}] \\ &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^2}\left[(T_1+T_2+w)\,\gamma_N^{(2)}\right] \end{aligned} \tag{3.20}$$

et il s'agit de décrire la limite des matrices de densité réduite $\gamma_N^{(1)}$ et $\gamma_N^{(2)}$. Vu que les suites $(\gamma_N^{(n)})$ sont par définition bornées dans $\mathfrak{S}^1$, modulo un procédé d'extraction diagonale, on peut supposer que pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \gamma^{(n)} \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}_s^n)$$

faiblement-$*$ dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$, c'est-à-dire que pour tout opérateur compact K_n sur $\mathfrak{H}^n$ on a

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma_N^{(n)} K_n] \to \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)} K_n].$$

Nous allons montrer que la limite est en fait forte. Pour cela, il suffit (voir [46, 138] ou l'Addendum H de [155]) de montrer que

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^n}[\gamma^{(n)}] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^n}[\gamma_N^{(n)}] = 1 \tag{3.21}$$

c'est-à-dire qu'aucune masse n'est perdue à la limite. On commence par remarquer que $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}]$ est uniformément bornée et que donc, quitte à réextraire on a

$$(T+C_0)^{1/2}\,\gamma_N^{(1)}\,(T+C_0)^{1/2} \rightharpoonup_* (T+C_0)^{1/2}\,\gamma^{(1)}\,(T+C_0)^{1/2}$$

pour une certaine constante C_0. Conséquement

$$\begin{aligned} 1 = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[\gamma_N^{(1)}] &= \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[(T+C_0)^{-1}\,(T+C_0)^{1/2}\,\gamma_N^{(1)}\,(T+C_0)^{1/2}\right] \\ &\to \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[(T+C_0)^{-1}\,(T+C_0)^{1/2}\,\gamma^{(1)}\,(T+C_0)^{1/2}\right] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[\gamma^{(1)}] \end{aligned}$$

puisque $(T+C_0)^{-1}$ est par l'hypothèse (3.12) un opérateur compact. On obtient (3.21) de la même manière en notant que

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] = \frac{1}{n}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[\sum_{j=1}^n T_j \gamma_N^{(n)}\right]$$

est borné unfiormément en N et que $\sum_{j=1}^n T_j$ est également à résolvante compacte, ce qui permet un raisonnement similaire.

On a donc pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\gamma_N^{(n)} \to \gamma^{(n)}$$

fortement en norme de trace et en particulier, pour tout opérateur borné B_n sur $\mathfrak{H}^n$

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma_N^{(n)} B_n] \to \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)} B_n].$$

En testant cette convergence avec $B_{n+1} = B_n \otimes \mathbb{1}$ on déduit

$$\mathrm{Tr}_{n+1}[\gamma^{(n+1)}] = \gamma^{(n)}$$

et donc que la suite $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ décrit un état bosonique à nombre infini de particules au sens de la Définition 3.2. On peut lui appliquer le Théorème 3.4, ce qui donne une mesure

$\mu \in \mathcal{P}(S\mathfrak{H})$. Au vu de l'hypothèse (3.3), l'opérateur $T_1 + T_2 + w$ est borné inférieurement sur $\mathfrak{H}^2$, disons par $2C_T$. Comme $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \gamma^{(2)} = 1$ on peut écrire

$$\begin{aligned}\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[(T_1 + T_2 + w) \gamma_N^{(2)} \right] &= \liminf_{N\to\infty} \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[(T_1 + T_2 + w - 2C_T) \gamma_N^{(2)} \right] + C_T \\ &\geq \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[(T_1 + T_2 + w - 2C_T) \gamma^{(2)} \right] + C_T \\ &= \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[(T_1 + T_2 + w) \gamma^{(2)} \right]\end{aligned}$$

en utilisant le lemme de Fatou pour les opérateurs positifs. On a donc, par linéarité de l'énergie en fonction de $\gamma^{(2)}$ et (3.17)

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} \geq \int_{u\in S\mathfrak{H}} \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[(T_1 + T_2 + w) |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| \right] d\mu(u) = \int_{u\in S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] d\mu(u) \geq e_{\mathrm{H}}$$

ce qui est la borne inférieure souhaitée. Les autres résultats du Théorème suivent comme d'habitude en notant qu'il doit y avoir égalité dans toutes les inégalités précédentes. □

On voit bien dans la preuve précédente que c'est la structure des états bosoniques à nombre infini de particules qui joue le rôle clé. Le Hamiltonien lui-même pourrait être choisi de manière très abstraite du moment qu'il comporte un mécanisme de confinement permettant d'obtenir des limite fortes. Divers exemples sont mentionnés dans [96], Section 3.

3.2. **Systèmes sans états liés et Théorème de de Finetti faible.**

A la section précédente nous avons utilisé fortement le fait que le système était confiné au sens de (3.10)-(3.11). Ces hypothèses sont suffisantes pour comprendre de nombreux cas physiques, mais il est très désirable de pouvoir s'en passer. On est alors amené à étudier le cas où la convergence des matrices densité n'est pas mieux que faible-$*$, et à décrire le plus exhaustivement possible les différents scénarii possibles, dans l'esprit du principe de concentration-compacité. Une première étape, avant de se poser la question de la façon dont la compacité peut être perdue consiste à décrire les limites faibles elles-mêmes. Il se trouve qu'on conserve une description très satisfaisante à la limite. En fait, on ne pouvait espérer mieux que le théorème suivant, démontré dans [96]:

Théorème 3.6 (De Finetti quantique faible).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et $(\Gamma_N)_{N\in\mathbb{N}}$ une suite d'état bosoniques avec $\Gamma_N \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}_s^N)$. On suppose que pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\Gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \gamma^{(n)} \tag{3.22}$$

dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}_s^n)$. Il existe alors une unique mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{P}(B\mathfrak{H})$ sur la boule unité $B\mathfrak{H} = \{u \in \mathfrak{H}, \|u\| \leq 1\}$ de $\mathfrak{H}$, invariante par l'action de S^1, telle que

$$\gamma^{(n)} = \int_{B\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \, d\mu(u) \tag{3.23}$$

pour tout $n \geq 0$.

Remarque 3.7 (Sur le théorème de de Finetti quantique faible).

(1) L'hypothèse (3.22) n'en est pas vraiment une en pratique. A une extraction diagonale prêt, on pourra toujours supposer que la convergence a lieu le long d'une sous-suite. Ce théorème décrit donc bien toutes les limites possibles pour une suite d'états bosoniques à N corps quand $N \to \infty$.
(2) Le fait que la mesure vive sur la boule unité dans (3.23) n'est pas une surprise puisque qu'il y a potentiellement une perte de masse dans les cas traités par le théorème. En particulier, il est fort possible que $\gamma^{(n)} = 0$ pour tout n auquel cas $\mu = \delta_0$, la masse de Dirac à l'origine.
(3) Le mot faible renvoit à "convergence faible" et n'indique pas une moindre portée du théorème. Le résultat est en fait plus général que le théorème de de Finetti fort. Il suffit pour s'en rendre compte de traiter le cas sans perte de masse où $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)}] = 1$. La mesure μ doit alors bien sûr être supportée sur la sphère et la convergence avoir lieu en norme. Il est d'ailleurs suffisant de supposer que $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)}] = 1$ pour un certain $n \in \mathbb{N}$, et la convergence est forte pour tout n puisque la mesure μ ne dépend pas de n.
(4) Ammari et Nier démontrent des résultats un peu plus généraux, voir [3, 4, 5, 6]. En particulier il n'est pas nécessaire de partir d'un état à nombre de particules fixé. On pourrait considérer un état sur l'espace de Fock du moment que des bornes convenables sur l'espérance de son nombre de particules sont disponibles.
(5) L'unicité de la mesure se prouve par un argument simple, voir [96, Section 2]. Ici nous serons principalement intéressés par l'existence, qui nous suffit pour des problèmes statiques. Pour des problème dépendant du temps, l'unicité est en revanche cruciale [4, 5, 6, 29].

□

Revenant à la dérivation de la théorie de Hartree, rappellons que la borne supérieure (3.8) est toujours vraie. Nous ne sommes donc à la recherche que de bornes inférieures. Un cas où il est suffisant de décrire la limite faible-$*$ des matrices densités est bien sûr celui d'une énergie faiblement semi-continue inférieurement. Cette remarque serait d'un intérêt marginal si ce cas ne recouvrait pas une classe de systèmes importants, les systèmes sans états liés.

Nous allons maintenant démontrer la validité de l'approximation de Hartree dans ce cas en nous basant sur le Théorème 3.6. Nous allons travailler dans $\mathbb{R}^d$ et supposer pour simplifier que le potentiel V de (3.2) ne fournit de confinement dans aucune direction:

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d), \max 1, d/2 \leq p < \infty, V(x) \to 0 \text{ quand } |x| \to \infty. \tag{3.24}$$

L'hypothèse d'absence d'états liés concerne le potentiel d'interaction w. Elle est matérialisée par l'inégalité[19]

$$-\Delta + \frac{w}{2} \geq 0 \tag{3.25}$$

au sens des opérateurs. Ceci formalise le fait que le potentiel w n'est pas assez attractif pour que les particules forment des états liés (molécules etc ...). En effet, vue l'hypothèse (3.4), $-\Delta + \frac{w}{2}$ ne peut avoir que des valeurs propres négatives, son spectre essentiel commençant en 0. Vu (3.25), il ne peut en fait avoir de valeurs propres du tout, et donc pas de fonctions

[19]Ou une variante si on considère une énergie cinétique différente, cf Remarque 3.1.

propres qui sont par définition les états liés du potentiel. Un exemple particulier est le cas d'un potentiel purement répulsif $w \geq 0$.

Sous l'hypothèse (3.25) les particules qui s'échappent éventuellement à l'infini ne voient plus le potentiel V et portent forcément une énergie positive qui peut être négligée pour une borne inférieure sur l'énergie totale. Les particules qui restent confinées par le potentiel V sont décrites par les limites faibles-$*$ des matrices densité, auxquelles on peut appliquer le théorème de de Finetti faible. Ce raisonnement mène au résultat suivant, pour lequel on a besoin de la notation

$$e_{\rm H}(\lambda) := \inf_{\|u\|^2=\lambda} \mathcal{E}_{\rm H}[u], 0 \leq \lambda \leq 1 \tag{3.26}$$

pour l'énergie de Hartree dans le cas d'une perte de masse. Sous l'hypothèse (3.25) il n'est pas difficile de montrer que pour tout $0 \leq \lambda \leq 1$

$$e_{\rm H}(\lambda) \geq e_{\rm H}(1) = e_{\rm H} \tag{3.27}$$

en construisant des états tests constitués de deux morceaux de masse bien séparés.

Théorème 3.8 (Dérivation de la théorie de Hartree, cas sans états liés).
Sous les hypothèses précédentes, en particulier (3.24) *et* (3.25) *on a*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = e_{\rm H}.$$

Soit Ψ_N un fondamental de H_N réalisant l'infimum (3.5) *et*

$$\gamma_N^{(n)} := {\rm Tr}_{n+1\to N}\left[|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\right]$$

sa n-ième matrice de densité réduite. Il existe une mesure de proabilité μ sur

$$\mathcal{M}_{\rm H} = \left\{u \in B\mathfrak{H},\ \mathcal{E}_{\rm H}[u] = e_{\rm H}\left(\|u\|^2\right) = e_{\rm H}(1)\right\}$$

telle que, le long d'une sous-suite et pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \int_{\mathcal{M}_{\rm H}} d\mu(u)\ |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \tag{3.28}$$

dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$. En particulier, si $e_{\rm H}$ a un minimiseur unique $u_{\rm H}$ avec $\|u_{\rm H}\| = 1$, alors pour toute la suite

$$\lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = |u_{\rm H}^{\otimes n}\rangle\langle u_{\rm H}^{\otimes n}| \tag{3.29}$$

fortement en norme de trace.

Remarque 3.9 (Cas avec perte de masse).
On notera qu'il est tout à fait possible que la convergence reste faible-$*$, ce qui recouvre une certaine réalité physique. Si le potentiel à un corps n'est pas assez attractif pour retenir toutes les particules on aura typiquement un scénario où:

$$e_{\rm H}(\lambda) = e_{\rm H}(1) \text{ pour } \lambda_c \leq \lambda \leq 1, e_{\rm H}(\lambda) < e_{\rm H}(1) \text{ pour } 0 \leq \lambda < \lambda_c$$

avec λ_c une masse critique qui peut être liée par le potentiel V. Dans ce cas, $e_{\rm H}(\lambda)$ ne sera pas atteint pour $\lambda_c < \lambda \leq 1$ et on aura un minimiseur pour l'énergie de Hartree

uniquement pour une masse $0 \leq \lambda \leq \lambda_c$. Typiquement le minimiseur $u_{\rm H}$ à masse λ_c sera unique modulo une phase constante et dans ce cas le Théorème 3.8 montre que

$$\gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* |u_{\rm H}^{\otimes n}\rangle\langle u_{\rm H}^{\otimes n}|$$

et on remarquera que la limite a une masse $\lambda_c^n < 1$. Ce scénario se produit effectivement dans le cas d'un "atome bosonique", voir Section 4.2 dans [96]. □

Le Théorème 3.8 est prouvé dans [96]. Pour pouvoir appliquer le Théorème 3.6 on commence par l'observation suivante:

Lemme 3.10 (Semi-continuité inférieure d'une énergie sans états liés). *Sous les hypothèses précédentes, soient deux suites $\gamma_N^{(1)}, \gamma_N^{(2)} \geq 0$ satisfaisant*

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\, \gamma_N^{(2)} = 1, \quad \gamma_N^{(1)} = \mathrm{Tr}_2\, \gamma_N^{(2)}$$

ainsi que $\gamma_N^{(k)} \rightharpoonup_* \gamma^{(k)}$ faiblement-$*$ dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^k)$ pour $k = 1, 2$. On a

$$\liminf_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma_N^{(2)}] \right) \geq \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma^{(2)}]. \tag{3.30}$$

Preuve. On introduit deux fonctions de troncature $0 \leq \chi_R, \eta_R \leq 1$ satisfaisant

$$\chi_R^2 + \eta_R^2 \equiv 1, \mathrm{supp}(\chi_R) \subset B(0, 2R), \mathrm{supp}(\eta_R) \subset B(0, R)^c, |\nabla\chi_R| + |\nabla\eta_R| \leq CR^{-1}$$

et il est aisé de montrer (il s'agit de la formule IMS) que

$$\begin{aligned} -\Delta = \chi_R(-\Delta)\chi_R + \eta_R(-\Delta)\eta_R - |\nabla\chi_R|^2 - |\nabla\eta_R|^2 \\ \geq \chi_R(-\Delta)\chi_R + \eta_R(-\Delta)\eta_R - CR^{-2} \end{aligned} \tag{3.31}$$

en tant qu'opérateur. Pour la partie à un corps de l'énergie on a donc aisément

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] \geq \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R] + \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R] + r_1(N, R)$$

avec

$$r_1(N, R) \geq -CR^{-2} + \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[\eta_R^2 V\gamma_N^{(1)}]$$

et donc

$$\liminf_{R\to\infty} \liminf_{N\to\infty} r_1(N, R) = 0$$

au vu de l'hypothèse (3.24) qui implique

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[\eta_R^2 V\gamma_N^{(1)}] = \int_{\mathbb{R}^d} \eta_R^2(x)V(x)\rho_N^{(1)}(x)dx \to 0 \text{ quand } R \to \infty$$

uniformément en N. Nous avons noté $\rho_N^{(1)}$ la densité à un corps de $\gamma_N^{(1)}$, définie formellement par

$$\rho_N^{(1)}(x) = \gamma_N^{(1)}(x, x)$$

en identifiant $\gamma_N^{(1)}$ et son noyau. Pour traiter les interactions nous introduisons

$$\rho_N^{(2)}(x, y) := \gamma_N^{(2)}(x, y; x, y)$$

la densité à deux corps de $\gamma_N^{(2)}$ (qu'on a identifié avec son noyau $\gamma_N^{(2)}(x',y';x,y)$) et écrivons

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma_N^{(2)}] &= \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\rho_N^{(2)}(x,y)dxdy \\
&= \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\chi_R^2(x)\rho_N^{(2)}(x,y)\chi_R^2(y)dxdy \\
&+ \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\eta_R^2(x)\rho_N^{(2)}(x,y)\eta_R^2(y)dxdy \\
&+ 2\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\chi_R^2(x)\rho_N^{(2)}(x,y)\eta_R^2(y)dxdy \\
&= \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\chi_R^2(x)\rho_N^{(2)}(x,y)\chi_R^2(y)dxdy \\
&+ \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\eta_R^2(x)\rho_N^{(2)}(x,y)\eta_R^2(y)dxdy \\
&+ r_2(N,R) \\
&= \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\chi_R\otimes\chi_R\gamma_N^{(2)}\chi_R\otimes\chi_R] + \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\eta_R\otimes\eta_R\gamma_N^{(2)}\eta_R\otimes\eta_R] \\
&+ r_2(N,R)
\end{aligned}$$

où

$$\liminf_{R\to\infty}\liminf_{N\to\infty} r_2(N,R) = 0$$

par un raisonnement de concentration-compacité standard (voir les détails dans la Section 4 de [96]).

On a donc à ce stade,

$$\begin{aligned}
\liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma_N^{(2)}] \geq \\
\liminf_{R\to\infty}\liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\chi_R\otimes\chi_R\gamma_N^{(2)}\chi_R\otimes\chi_R] \\
+ \liminf_{R\to\infty}\liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\eta_R\otimes\eta_R\gamma_N^{(2)}\eta_R\otimes\eta_R] \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Les termes de la seconde ligne donnent le membre de droite de (3.30). En effet on rappelle que $T=-\Delta+V$, et en utilisant le lemme de Fatou pour $-\Delta\geq 0$ et le fait que

$$\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R \to \chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R$$

en norme puisque χ_R est à support compact, on a

$$\liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R] \geq \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\chi_R\gamma^{(1)}\chi_R]$$

et il suffit de rappeler que $\chi_R\to 1$ ponctuellement pour conclure. Le terme d'interaction est traité de la même manière en utilisant la convergence forte

$$\chi_R\otimes\chi_R\gamma_N^{(2)}\chi_R\otimes\chi_R \to \chi_R\otimes\chi_R\gamma_N^{(2)}\chi_R\otimes\chi_R$$

puis la convergence ponctuelle $\chi_R\to 1$.

Les termes de la troisième ligne de (3.32) forment une combinaison positive que l'on peut négliger pour une borne inférieure. Pour le voir on note que comme $0 \leq \eta_R \leq 1$ on a $\eta_R \otimes \mathbb{1} \geq \eta_R \otimes \eta_R$ et (Tr_2 symbolise la trace partielle par rapport à la deuxième variable)

$$\eta_R \gamma_N^{(1)} \eta_R \geq \mathrm{Tr}_2[\eta_R \otimes \eta_R \gamma_N^{(2)} \eta_R \otimes \eta_R]$$

ce qui donne, par symétrie de $\gamma_N^{(2)}$,

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}}[-\Delta \eta_R \gamma_N^{(1)} \eta_R] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}^2}[w\,\eta_R \otimes \eta_R \gamma_N^{(2)} \eta_R \otimes \eta_R] \\ \geq \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}^2}\left[((-\Delta)\otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes (-\Delta) + w)\ \eta_R \otimes \eta_R \gamma_N^{(2)} \eta_R \otimes \eta_R\right]\end{aligned}$$

et il n'est pas difficile[20] de voir que l'hypothèse (3.25) implique

$$(-\Delta)\otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes (-\Delta) + w \geq 0$$

ce qui assure que la troisième ligne de (3.32) est positive et conclut la preuve. □

Nous pouvons conclure la

Preuve du Théorème 3.8. Partant d'une suite $\Gamma_N = |\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|$ d'états à N corps on extrait des sous-suites comme dans la preuve du Théorème 3.5 pour avoir

$$\Gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \gamma^{(n)}.$$

Grâce au Lemme 3.10, on obtient

$$\begin{aligned}\liminf_{N\to\infty} N^{-1}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N}[H_N \Gamma_N] &= \liminf_{N\to\infty}\left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}}[T\Gamma_N^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}^2}[w\Gamma_N^{(2)}]\right) \\ &\geq \mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}}[T\gamma^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}^2}[w\gamma^{(2)}]\end{aligned}$$

et il reste à appliquer le théorème 3.6 à la suite $(\gamma^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ pour obtenir

$$\liminf_{N\to\infty} N^{-1}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N}[H_N \Gamma_N] \geq \int_{B\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] d\mu(u) \geq e_{\mathrm{H}}$$

en utilisant (3.27) et le fait que $\int_{B\mathfrak{H}} d\mu(u) = 1$. Encore une fois, les autres conclusions du théorème suivent aisément en inspectant les cas d'égalité dans les différentes estimations. □

Pour la suite des opérations, notons que au cours de la preuve du Lemme 3.10 nous avons démontré le résultat intermédiaire (3.32), sans utiliser l'hypothèse que le potentiel w n'a pas d'états liés (qui n'est intervenu qu'à un stade ultérieur de la preuve). Nous formulons ceci sous forme d'un lemme que nous réutiliserons au Chapitre (6).

Lemme 3.11 (**Localisation de l'énergie**).
Sous les hypothèses (3.4) *et* (3.24)*, soit une suite* Ψ_N *de quasi-minimiseurs de* $E(N)$*:*

$$\langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle = E(N) + o(N)$$

[20] Il suffit de découpler le centre de masse du mouvement relatif des deux particules, c'est à dire faire le changement de variable $(x_1, x_2) \mapsto (x_1 + x_2, x_1 - x_2)$.

et $\gamma_N^{(k)}$ *les matrices de densité réduites associées. On a*

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = \liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\gamma_N^{(1)}] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma_N^{(2)}] \geq$$
$$\liminf_{R\to\infty} \liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\chi_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\chi_R^{\otimes 2}]$$
$$+ \liminf_{R\to\infty} \liminf_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\,\eta_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\eta_R^{\otimes 2}] \quad (3.33)$$

où $0 \leq \chi_R \leq 1$ *est* C^1*, à support dans* $B(0,R)$*, et* $\eta_R = \sqrt{1-\chi_R^2}$.

3.3. **Relation entre les différents résultats de structure pour les états bosoniques.**

Nous venons d'introduire deux théorèmes de structure pour les systèmes bosoniques à grand nombre de particules, qui indiquent que moralement, si Γ_N est un état à N bosons sur un espace de Hilbert séparable $\mathfrak{H}$, on a une mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{P}(\mathfrak{H})$ sur l'espace de Hilbert à un corps telle que

$$\Gamma_N^{(n)} \approx \int_{u\in\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu(u) \quad (3.34)$$

quand N est grand et n fixe. Les Chapitres 4 et 5 de ces notes seront en grande partie consacrés à la preuve des ces théorèmes "à la de Finetti". Comme indiqué à la Remarque 3.7, le Théorème 3.6 est en fait plus général que le Théorème 3.4, et nous prouverons donc le premier.

Pour bien voir l'apport du Théorème faible en dimension infinie, soulignons que la propriété clé qui permet de démontrer le Théorème fort est la consistance (3.14). Lorsqu'on part des matrices réduites $\Gamma_N^{(n)}$ d'un état à N particules Γ_N et qu'on extrait des sous-suites au sens de la convergence faible-$*$ pour définir la hiérarchie $\left(\gamma^{(n)}\right)_{n\in\mathbb{N}}$,

$$\Gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \gamma^{(n)},$$

on a seulement

$$\mathrm{Tr}_{n+1}\left[\gamma^{(n+1)}\right] \leq \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{n+1}\left[\gamma_N^{(n+1)}\right] = \lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = \gamma^{(n)}.$$

car *la trace n'est pas continue*[21] *pour la topologie faible-*$*$, seulement semi-continue inférieurement. Il est évident que la relation de "sous-consistance"

$$\mathrm{Tr}_{n+1}\left[\gamma^{(n+1)}\right] \leq \gamma^{(n)} \quad (3.35)$$

est insuffisante pour avoir un théorème à la de Finetti. Un contre-exemple simple est donné par la suite des matrices densité d'un état à un corps $v \in S\mathfrak{H}$:

$$\gamma^{(0)} = 1, \gamma^{(1)} = |v\rangle\langle v|, \gamma^{(n)} = 0 \text{ pour } n \geq 2$$

Le parti-pris que nous suivrons dans ces notes sera de fournir une preuve la plus constructive possible du Théorème de de Finetti faible. Avant d'en annoncer le plan, disons quelques mots de l'approche beaucoup plus abstraite des références historiques [164, 82].

[21] Ceci est une caractérisation des espaces de dimension infinie

Ces travaux contiennent en fait une forme du théorème encore plus générale que la version faible du Théorème 3.6. Ce résultat s'applique à des états "abstraits", c'est-à-dire non nécessairement normaux et non nécessairement bosoniques, qui peuvent être définis comme suit:

Définition 3.12 (**Etat abstrait à nombre infini de particules**).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et pour $n \in \mathbb{N}$, $\mathfrak{H}^n = \bigotimes^n \mathfrak{H}$ l'espace à n corps correspondant. On appelle *état abstrait à nombre infini de particules* une suite $(\omega^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ avec

- $\omega^{(n)}$ un état abstrait à n particules : $\omega^{(n)} \in (\mathfrak{B}(\mathfrak{H}^n))^*$, le dual des opérateurs bornés sur $\mathfrak{H}^n$, $\omega^{(n)} \geq 0$ et
$$\omega^{(n)}(\mathbb{1}_{\mathfrak{H}^n}) = 1. \tag{3.36}$$
- $\omega^{(n)}$ est symétrique au sens où
$$\omega^{(n)}\left(B_1 \otimes \dots B_n\right) = \omega^{(n)}\left(B_{\sigma(1)} \otimes \dots B_{\sigma(n)}\right) \tag{3.37}$$
pour tous $B_1, \dots, B_n \in \mathfrak{B}(\mathfrak{H})$ et toute permutation $\sigma \in \Sigma_n$.
- la suite $(\omega^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ est consistante:
$$\omega^{(n+1)}\left(B_1 \otimes \dots B_n \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}\right) = \omega^{(n)}\left(B_1 \otimes \dots B_n\right) \tag{3.38}$$
pour tous $B_1, \dots, B_n \in \mathfrak{B}(\mathfrak{H})$.

□

Ces états abstraits ne sont en général pas localement normaux, c'est-à-dire ne rentrent pas dans le cadre de la définition suivante:

Définition 3.13 (**Etat normal, état localement normal**).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et $(\omega^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ un état abstrait à nombre infini de particules. On dit que $(\omega^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ est localement normal si $\omega^{(n)}$ est normal pour tout $n \in \mathbb{N}$, c'est-à-dire qu'il existe $\gamma^{(n)} \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$ un opérateur à trace tel que
$$\omega^{(n)}(B_n) = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[\gamma^{(n)} B_n] \tag{3.39}$$
pour tout $B_n \in \mathfrak{B}(\mathfrak{H}^n)$. □

En identifiant les opérateurs à trace et les états normaux correspondants on voit bien que la Définition 3.2 est un cas particulier d'état abstrait à nombre infini de particules. On notera que (par le théorème spectral) l'ensemble des combinaisons convexes d'états purs (les projecteurs) coïncide avec les états à trace. Un état abstrait n'est donc pas une combinaison convexe d'états purs, donc pas un état mixte (i.e. un mélange statistique d'états purs). Son interprétation physique n'est donc pas évidente.

La notion de consistance (3.38) est la généralisation naturelle de (3.14) mais il est important de noter que la symétrie (3.37) est de nature plus faible que la symétrie bosonique. Il s'agit en fait de la notion de symétrie correspondant à des particules indiscernables classiquement (le module de la fonction d'onde est symétrique mais pas la fonction d'onde elle-même). On peut par exemple noter que si $\omega^{(n)}$ est normal au sens de (3.39), alors $\gamma^{(n)} \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$ satisfait
$$U_\sigma \gamma^{(n)} U_\sigma^* = \gamma^{(n)}$$

où U_σ est l'opérateur unitaire permutant les n particules suivant $\sigma \in \Sigma_n$. La symétrie bosonique correspond à la contrainte plus forte

$$U_\sigma \gamma^{(n)} = \gamma^{(n)} U_\sigma^* = \gamma^{(n)},$$

cf Section 1.2. On a également une notion d'états produits plus générale que la Définition 3.3.

Définition 3.14 (Etat produit abstrait à nombre infini de particules).
On appelle *état produit abstrait* un état abstrait à nombre infini de particules avec

$$\omega^{(n)} = \omega^{\otimes n} \tag{3.40}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$, où $\omega \in (\mathfrak{B}(\mathfrak{H}))^*$ est un état abstait à une particule (en particulier $\omega \geq 0$ et $\omega(\mathbb{1}_\mathfrak{H}) = 1$). □

Le théorème de de Finetti quantique sous sa forme la plus générale énonce que **tout état abstait à nombre infini de particules est une combinaison convexe d'états produits abstraits**:

Théorème 3.15 (De Finetti quantique abstrait).
Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable et $(\omega^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ un état bosonique abstrait à nombre infini de particules sur $\mathfrak{H}$. Il existe une unique mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{P}\left((\mathfrak{B}(\mathfrak{H}))^*\right)$ sur le dual des opérateurs bornés de $\mathfrak{H}$ telle que

$$\mu\left(\{\omega \in (\mathfrak{B}(\mathfrak{H}))^*, \omega \geq 0, \omega(\mathbb{1}_\mathfrak{H}) = 1\}\right) = 1 \tag{3.41}$$

et

$$\omega^{(n)} = \int \omega^{\otimes n} \, d\mu(\omega) \tag{3.42}$$

pour tout $n \geq 0$.

Remarque 3.16 (Sur le théorème de de Finetti quantique abstrait).

(1) Ce théorème a été démontré pour la première fois par Størmer dans [164]. Hudson et Moody [82] ont ensuite fourni une preuve plus simple en adaptant l'argument donné par Hewitt-Savage pour la preuve du Théorème de de Finetti classique 2.1: ils montrent que les états produits sont les points extrêmaux de l'ensemble convexe des états abstraits à nombre infini de particules et obtiennent l'existence de la mesure par le théorème de Choquet. Cette preuve nécessite la notion d'états abstraits et ne fournit pas directement de preuve du Théorème 3.4.
(2) Hudson et Moody [82] déduisent le théorème de de Finetti fort du théorème de de Finetti abstrait. Une adaptation de leur méthode (voir [96], Appendice A) montre que le théorème de de Finetti faible est aussi une conséquence du théorème abstrait.
(3) Ce résultat a été utilisé pour dériver des théories de type Hartree pour des états abstraits sans symétrie bosonique dans [63, 134, 129]. Pour retrouver une théorie de Hartree au sens usuel du terme il faut pouvoir montrer que l'état limite est (localement) normal. En dimension finie $\mathfrak{B}(\mathfrak{H})$ coïncide bien sûr avec les opérateurs compacts, ce qui implique que tout état abstait est normal, et on a pas cette difficulté.

□

A ce stade nous avons donc le schéma ("deF" pour de Finetti)

$$\boxed{\text{deF abstrait } \Rightarrow \text{ deF faible } \Rightarrow \text{ deF fort}}, \tag{3.43}$$

mais la preuve du théorème de de Finetti faible que nous allons présenter suivra une autre route, utilisée dans [96, 95]. Elle part du théorème en dimension finie[22]:

$$\boxed{\text{deF en dimension finie } \Rightarrow \text{ deF faible } \Rightarrow \text{ deF fort}}. \tag{3.44}$$

Il se trouve que cette approche fournit une preuve plutôt plus longue que le schéma (3.43) partant de la preuve de Hudson-Moody du Théorème 3.15. Ce détour se motive par cinq raisons principales, d'ordre esthétique autant que pratique:

(1) La preuve suivant (3.44) est plus simple d'un point de vue conceptuel: elle ne nécessite ni la notion d'état abstrait ni le recours au Théorème de Choquet.
(2) Grâce à des progrès principalement dûs à la communauté d'information quantique (voir [32, 31, 78, 91, 64, 95]) on dispose maintenant d'une preuve entièrement constructive du théorème de de Finetti en dimension finie. Il s'agit d'abord de prouver des estimations explicites grâce à une construction à N fini, dans l'esprit de Diaconis-Freedman pour le cas classique, puis de passer à la limite comme dans la preuve du théorème de Hewitt-Savage que nous avons présentée à la Section 2.2.
(3) La première implication du schéma (3.44) est également essentiellement constructive, grâce aux outils de localisation dans l'espace de Fock utilisés par exemple dans [2, 48, 94]. Ces outils sont hérités des méthodes dites "géométriques" [59, 60, 152, 154] qui adaptent au problème à N corps des idées de localisation naturelles pour le problème à un corps. Ils permettent entre autres une description fine du défaut de compacité par perte de masse à l'infini, dans l'esprit du principe de concentration-compacité [118, 119].
(4) En particulier, la preuve de la première implication dans (3.44) fournit quelques corollaires importants qui permettent de prouver la validité de la théorie de Hartree dans le cas général. Quand les hypothèses faites à la Section 3.2 ne sont pas valables, le théorème de de Finetti faible et sa preuve fournie par le schéma (3.43) ne sont pas suffisants pour conclure: les particules s'échappant à l'infini peuvent former des états liés d'énergie négative. Les méthodes de localisation que nous présenterons permettent d'analyser ce phénomène.
(5) Au chapitre 7 nous traiterons un cas où le potentiel d'interaction dépend de N pour dériver une description de type Schrödinger non-linéaire à la limite. Ceci revient à prendre une limite où w converge vers une masse de Dirac *en même temps* que la limite $N \to \infty$. Dans ce cas, les arguments de compacité ne sont pas suffisants et les estimations explicites que nous présenterons pour prouver le théoòrème de de Finetti en dimension finie s'avéreront bien utiles.

Un point de vue alternatif sur le schéma (3.44) est fourni par l'approche de Ammari-Nier [3, 4, 5, 6], basée sur des méthodes d'analyse semi-classique. Nous aurons l'occasion de préciser la relation entre les deux approches dans la suite de ces notes.

Comme noté plus haut, la seconde implication dans (3.44) est relativement évidente. Les chapitres suivants explorent le début du schéma et contiennent la preuve du théorème de de Finetti faible ainsi que plusieurs corollaires et résultats intermédiaires utiles. Le

[22]Pour lequel il n'y a évidemment pas lieu de distinguer entre théorème faible et théorème fort.

théorème de de Finetti en dimension finie (où il n'y a pas lieu de distinguer entre faible et fort) est discuté dans le Chapitre 4. Les méthodes de localisation permettant de montrer la première implication dans (3.44) sont l'objet du Chapitre 5.

4. Théorème de de Finetti quantique en dimension finie

Ce chapitre est consacré au point de départ du schéma de preuve (3.44), à savoir une preuve du théorème de de Finetti fort dans le cas d'un espace de Hilbert séparable $\mathfrak{H}$ *de dimension finie*,

$$\dim \mathfrak{H} = d.$$

Dans ce cas il n'y a pas lieu de distinguer entre théorème fort et faible puisque les convergences forte et faible-$*$ sont équivalentes dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^n)$. L'avantage de travailler en dimension finie est la possibilité d'obtenir des estimations explicites dans l'esprit du théorème de Diaconis-Freedman. Nous allons en fait prouver le résultat suivant, qui donne des bornes en norme de trace, la norme naturelle sur l'espace des états quantiques.

Théorème 4.1 (**De Finetti quantique quantitatif**)**.**
Soit $\Gamma_N \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}_s^N)$ un état sur $\mathfrak{H}_s^N$ et $\gamma_N^{(n)}$ ses matrices de densité réduites. Il existe une mesure de probabilité $\mu_N \in \mathcal{P}(S\mathfrak{H})$ telle que, notant

$$\tilde{\Gamma}_N = \int_{u \in S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}| d\mu_N(u) \tag{4.1}$$

l'état associé et $\tilde{\gamma}_N^{(n)}$ ses matrices de densité réduites, on ait

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n} \left| \gamma_N^{(n)} - \widetilde{\gamma}_N^{(n)} \right| \leq \frac{2n(d+2n)}{N} \tag{4.2}$$

pour tout $n = 1 \dots N$.

Remarque 4.2 (Sur le théorème de de Finetti en dimension finie).

(1) Ce résultat est essentiellement dû à Christandl, König, Mitchison et Renner [32], avec des précurseurs dans [91] et surtout [64]. On pourra trouver des développements dans [31, 78, 95]. La communauté d'information quantique s'est intéressée à diverses variantes, voir par exemple [32, 33, 34, 136, 22].

(2) On peut ajouter une implication au schéma (3.44):

$$\boxed{\text{deF quantitatif } \Rightarrow \text{deF en dimension finie } \Rightarrow \text{ deF faible } \Rightarrow \text{ deF fort}}. \tag{4.3}$$

En effet, en dimension finie on peut identifier la sphère $S\mathfrak{H}$ avec une sphère Euclidienne usuelle, compacte (de dimension $2d-1$, i.e. la sphère unité de $\mathbb{R}^{2d}$). L'espace des mesures de probabilité sur $S\mathfrak{H}$ est alors compact pour la topologie faible usuelle et on peut extraire de μ_N une sous-suite convergente pour démontrer le Théorème 3.4 dans le cas $\dim \mathfrak{H} < \infty$ exactement de la même façon que nous avons déduit le Théorème 2.1 du Théorème 2.2 à la Section 2.2.

(3) La borne (4.2) n'est pas optimale. On peut en fait obtenir l'estimation

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n} \left| \gamma_N^{(n)} - \widetilde{\gamma}_N^{(n)} \right| \leq \frac{2nd}{N}, \tag{4.4}$$

avec la même construction, voir [31, 32, 95]. La preuve que nous présenterons ne donne que (4.2) mais me paraît plus instructive. Pour les applications qui nous intéressent dans ces notes, n sera toujours fixe (égal à 2 la plupart du temps), et dans ce cas (4.2) et (4.4) donnent les mêmes ordres de grandeur en fonction de N et d.

(4) La borne (4.4) dans la cas quantique est l'équivalent de l'estimation en dn/N mentionnée à la Remarque 2.3. On peut se demander si cet ordre de grandeur est optimal. Il l'est clairement avec la construction que nous allons utiliser, mais il serait très intéressant de savoir si on peut faire mieux avec une autre construction. En particulier, peut-on prouver une borne indépendante de d, rappelant la borne (2.14) du théorème de Diaconis-Freedman ?

□

La construction de $\tilde{\Gamma}_N$ vient de [32]. Elle est particulièrement simple mais utilise à fond le fait que l'espace $\mathfrak{H}$ est de dimension finie. L'approche que nous suivrons pour la preuve du Théorème 4.1 est due originellement à Chiribella [31]. Nous allons prouver une formule explicite donnant les matrices densité de $\tilde{\Gamma}_N$ en fonction de celles de Γ_N, dans l'esprit de (2.15). Cette formule implique (4.2) de la même manière que (2.15) implique (2.14).

Dans la Section 4.1 nous présentons la construction, énonçons la formule explicite de Chiribella et démontrons le Théorème 4.1 comme corollaire. Avant de donner la preuve du résultat de Chiribella, il est utile de fournir une motivation informelle et quelques heuristiques sur la construction de Christandl-König-Mitchison-Renner (CKMR), qui se trouve être connectée à des idées bien connues d'analyse semi-classique. Ceci est l'objet de la Section 4.2. Finalement nous prouverons la formule de Chiribella à la Section 4.3, en suivant l'approche de [95]. Elle a été trouvée indépendament par Lieb et Solovej [113] (avec une motivation différente), et nous a été inspirée par les travaux de Ammari et Nier [4, 5, 6]. D'autres preuves sont possibles, cf [31] et [78].

4.1. **La construction de CKMR et la formule de Chiribella.**

En dimension finie, on peut identifier la sphère unité $S\mathfrak{H} = \{u \in \mathfrak{H}, \|u\| = 1\}$ avec une sphère euclidienne. On peut donc la munir de la mesure uniforme (mesure de Haar, simplement la mesure de Lebesgues sur la sphère euclidienne), que nous noterons du. On a alors par le lemme de Schur une résolution de l'identité de la forme

$$\dim \mathfrak{H}_s^N \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\, du = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}^N}, \tag{4.5}$$

ce qui est une simple conséquence de l'invariance par rotation de du.

L'idée de Christandl-König-Mitchison-Renner est alors de simplement poser

$$\begin{aligned} d\mu_N(u) &:= \dim \mathfrak{H}_s^N \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}_s^N} \left[\Gamma_N |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\right] du \\ &= \dim \mathfrak{H}_s^N \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}_s^N} \left\langle u^{\otimes N}, \Gamma_N u^{\otimes N}\right\rangle du \end{aligned} \tag{4.6}$$

c'est à dire de définir

$$\tilde{\Gamma}_N = \dim \mathfrak{H}_s^N \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}| \left\langle u^{\otimes N}, \Gamma_N u^{\otimes N}\right\rangle du. \tag{4.7}$$

L'observation de Chiribella[23] est la suivante:

[23]Formulée dans le vocabulaire de l'information quantique comme une relation entre le "clonage optimal" et les "canaux de mesure/préparation optimaux".

Théorème 4.3 (**Formule de Chiribella**).
Avec les définitions précédentes, on a

$$\tilde{\gamma}_N^{(n)} = \binom{N+n+d-1}{n}^{-1} \sum_{\ell=0}^{n} \binom{N}{\ell} \gamma_N^{(\ell)} \otimes_s \mathbb{1}_{\mathfrak{H}^{n-\ell}} \tag{4.8}$$

avec la convention

$$\gamma_N^{(\ell)} \otimes_s \mathbb{1}_{\mathfrak{H}^{n-\ell}} = \frac{1}{\ell!\,(n-\ell)!} \sum_{\sigma \in S_n} (\gamma_N^{\ell})_{\sigma(1),\dots,\sigma(\ell)} \otimes (\mathbb{1}_{\mathfrak{H}^{n-\ell}})_{\sigma(\ell+1),\dots,\sigma(n)}$$

où $(\gamma_N^{\ell})_{\sigma(1),\dots,\sigma(\ell)}$ *agit sur les variables* $\sigma(1)\dots,\sigma(\ell)$.

Nous pouvons déduire du résultat précédent une preuve simple du théorème de de Finetti quantitatif:

Preuve du Théorème 4.1. On procède comme en (2.21). Seul le premier terme de la somme (4.8) compte:

$$\tilde{\gamma}_N^{(n)} - \gamma_N^{(n)} = (C(d,n,N)-1)\gamma_N^{(n)} + B = -A + B \tag{4.9}$$

où

$$C(d,n,N) = \frac{(N+d-1)!}{(N+n+d-1)!}\frac{N!}{(N-n)!} < 1,$$

et A, B sont des opérateurs positifs. On a

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}[-A+B] = \mathrm{Tr}\left[\tilde{\gamma}_N^{(n)} - \gamma_N^{(n)}\right] = 0,$$

et donc, par l'inégalité triangulaire,

$$\mathrm{Tr}\left|\tilde{\gamma}_N^{(n)} - \gamma_N^{(n)}\right| \leq \mathrm{Tr}\, A + \mathrm{Tr}\, B = 2\,\mathrm{Tr}\, A = 2(1 - C(d,n,N)).$$

Ensuite, l'inégalité élémentaire

$$C(d,n,N) = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{N-j}{N+j+d} \geq \left(1 - \frac{2n+d-2}{N+d+n-1}\right)^k \geq 1 - n\frac{2n+d-2}{N+d+n-1}$$

donne

$$\mathrm{Tr}\left|\gamma_N^{(n)} - \tilde{\gamma}_N^{(n)}\right| \leq \frac{2n(d+2n)}{N}, \tag{4.10}$$

ce qui est le résultat souhaité. □

Tout repose désormais sur la preuve du Théorème 4.3, qui est l'objet de la Section 4.3. Avant de la présenter, nous donnons quelques indications heuristiques quant à la pertinence de la construction (4.7).

4.2. **Heuristiques et motivations.**

La formule de Schur (4.5) exprime le fait que la famille $\left(u^{\otimes N}\right)_{u\in S\mathfrak{H}}$ forme une base sur-complète de $\mathfrak{H}_s^N$. Une telle base indexée par un paramètre continu rappelle une décomposition en états cohérents [89, 169]. Cette base est en fait "de moins en moins sur-complète" lorsque N devient grand. En effet, on a clairement

$$\langle u^{\otimes N}, v^{\otimes N}\rangle_{\mathfrak{H}^N} = \langle u, v\rangle_{\mathfrak{H}}^N \to 0 \text{ quand } N\to\infty \tag{4.11}$$

dès que u et v ne sont pas exactement colinéaires. La base $\left(u^{\otimes N}\right)_{u\in S\mathfrak{H}}$ devient donc "quasiment orthonormale" quand N tend vers l'infini, et il est alors très naturel de s'attendre à ce que tout opérateur ait une représentation approchée de la forme (4.1).

Dans le vocabulaire de l'analyse semi-classique [102, 156, 13], chercher à écrire

$$\Gamma_N = \int_{u\in S\mathfrak{H}} d\mu_N(u)|u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|$$

revient à chercher un *symbole supérieur* μ_N représentant Γ_N. En fait, il se trouve [156] que l'on peut toujours trouver un tel symbole, seulement μ_N n'est en général pas une mesure positive. Le problème que nous nous posons est donc de trouver une manière d'approcher le symbole supérieur (dont on a par ailleurs pas d'expression explicite en fonction de l'état lui-même) par une mesure positive.

D'un autre côté, la mesure introduite en (4.6) est très exactement ce qu'on appelle le *symbole inférieur* de l'état Γ_N. Une des raisons pour lesquelles les symboles inférieurs et supérieurs ont étés introduits est que ces deux objets a priori différents ont tendance à coïncider dans les limites semi-classiques. Hors la limite $N\to\infty$ peut être vue comme une limite semi-classique, et il est donc très naturel de prendre le symbole inférieur comme une approximation du symbole supérieur dans cette limite.

On peut motiver ce choix de manière un peu plus précise. Supposons que nous avons une suite d'états à N particules définis à partir d'un même symbole supérieur indépendant de N,

$$\Gamma_N = \dim(\mathfrak{H}_s^N)\int_{u\in S\mathfrak{H}} \mu^{\sup}(u)|u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|du,$$

et calculons les symboles inférieurs correspondants:

$$\begin{aligned}\mu_N^{\inf}(v) = \langle v^{\otimes N}, \Gamma_N v^{\otimes N}\rangle &= \dim(\mathfrak{H}_s^N)\int_{u\in S\mathfrak{H}} \mu^{\sup}(u)\left|\langle u^{\otimes N}, v^{\otimes N}\rangle\right|^2 du\\ &= \dim(\mathfrak{H}_s^N)\int_{u\in S\mathfrak{H}} \mu^{\sup}(u)\left|\langle u, v\rangle\right|^{2N} du.\end{aligned}$$

Vue l'observation (4.11) et la nécessaire invariance par l'action de S^1 de $\mu^{\sup}$ il est clair qu'on a

$$\mu_N^{\inf}(v)\to\mu^{\sup}(v) \text{ quand } N\to\infty.$$

Autrement dit, le symbole inférieur est, pour N grand, une approximation du symbole supérieur, qui a en outre l'avantage d'être positif. Sans constituer une preuve rigoureuse du Théorème 4.1, ce point de vue indique que la construction de CKMR est extrêmement naturelle.

4.3. **La formule de Chiribella et la quantification d'anti-Wick.**

La preuve que nous allons donner du Théorème 4.3 utilise le formalisme de la seconde quantification. Commençons par un lemme bien utile, qui exprime dans le vocabulaire esquissé à la Section précédente qu'un état est entièrement caractérisé par son symbole inférieur, un fait bien connu [156, 89].

Lemme 4.4 (**Le symbole inférieur détermine l'état**).
Si un opérateur $\gamma^{(k)}$ *sur* $\mathfrak{H}_s^k$ *satisfait*

$$\langle u^{\otimes k}, \gamma^{(k)} u^{\otimes k} \rangle = 0 \qquad \textit{pour tout } u \in \mathfrak{H}, \tag{4.12}$$

alors $\gamma^{(k)} \equiv 0$.

Preuve. On utilise le produit tensoriel symétrique

$$\Psi_k \otimes_s \Psi_\ell(x_1, ..., x_k) = \frac{1}{\sqrt{\ell!(k-\ell)!k!}} \sum_{\sigma \in S_k} \Psi_\ell(x_{\sigma(1)}, ..., x_{\sigma(\ell)}) \Psi_{k-\ell}(x_{\sigma(\ell+1)}, ..., x_{\sigma(k)})$$

pour deux vecteurs $\Psi_\ell \in \mathfrak{H}^\ell$ et $\Psi_{k-\ell} \in \mathfrak{H}^{k-\ell}$.

En remplaçant u par $u + tv$ dans (4.12) et en prenant la dérivée par rapport à t, on obtient

$$\langle v \otimes_s u^{\otimes(k-1)}, \gamma^{(k)} v \otimes_s u^{\otimes(k-1)} \rangle = 0$$

pour tout $u, v \in \mathfrak{H}$. En prenant v de la forme $v = v_1 \pm \widetilde{v}_1$ puis $v = v_1 \pm i\widetilde{v}_1$ et en réitérant l'argument, on conclut

$$\langle v_1 \otimes_s v_2 \otimes_s \ldots \otimes_s v_k, \gamma^{(k)} \widetilde{v}_1 \otimes_s \widetilde{v}_2 \otimes_s \ldots \otimes_s \widetilde{v}_k \rangle = 0$$

pour tous $v_j, \widetilde{v}_j \in \mathfrak{H}$. Les vecteurs de la forme $v_1 \otimes_s v_2 \otimes_s \ldots \otimes_s v_k$ formant une base de $\mathfrak{H}_s^k$, la preuve est complète. □

Nous allons utiliser les opérateurs de création et d'annihiliation bosoniques standards. Pour tout $f_k \in \mathfrak{H}$, on définit l'opérateur de création $a^*(f_k) : \mathfrak{H}_s^{k-1} \to \mathfrak{H}_s^k$ par

$$a^*(f_k) \left(\sum_{\sigma \in S_{k-1}} f_{\sigma(1)} \otimes ... \otimes f_{\sigma(k-1)} \right) = (k)^{-1/2} \sum_{\sigma \in S_k} f_{\sigma(1)} \otimes ... \otimes f_{\sigma(k)}.$$

L'opérateur d'annihiliation $a(f) : \mathfrak{H}^{k+1} \to \mathfrak{H}^k$ est l'adjoint formel de $a^*(f)$ (d'où la notation), défini par

$$a(f) \left(\sum_{\sigma \in S_{k+1}} f_{\sigma(1)} \otimes ... \otimes f_{\sigma(k+1)} \right) = (k+1)^{1/2} \sum_{\sigma \in S_{k+1}} \left\langle f, f_{\sigma(1)} \right\rangle f_{\sigma(2)} \otimes ... \otimes f_{\sigma(k)}$$

pour tout $f, f_1, ..., f_k$ dans $\mathfrak{H}$. Ces opérateurs satisfont les *relations canoniques de commutation* (CCR en abrégeant le terme anglais)

$$[a(f), a(g)] = 0, \quad [a^*(f), a^*(g)] = 0, \quad [a(f), a^*(g)] = \langle f, g \rangle_{\mathfrak{H}}. \tag{4.13}$$

Un des intérêts de ces objets est que les matrices de densité réduites $\gamma_N^{(n)}$ d'un état bosonique Γ_N sont définies via[24]

$$\langle v^{\otimes n}, \gamma_N^{(n)} v^{\otimes n}\rangle = \frac{(N-n)!}{N!}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^N}\left[a^*(v)^n a(v)^n \Gamma_N\right] \tag{4.14}$$

ce qui caractérise complètement $\gamma_N^{(n)}$ vu le Lemme 4.4. La définition ci-dessus s'appelle une quantification de Wick, les opérateurs de création et d'annihilation y apparaissent dans l'ordre normal, c'est-à-dire tous les créateurs à gauche et tous les annihiliateurs à droite.

L'observation clé de la preuve du Théorème 4.3 est alors le fait que les matrices de densité de l'état (4.7) sont alternativement définies à partir de Γ_N par une quantification d'anti-Wick, où les opérateurs de création et d'annihilation apparaissent dans l'ordre anti-normal, c'est-à-dire tous les annihiliateurs à gauche et tous les créateurs à droite.

Lemme 4.5 (La construction de CKMR et la quantification d'anti-Wick). *Soit $\tilde{\Gamma}_N$ defini par (4.7) et $\tilde{\gamma}_N^{(n)}$ ses matrices de densité réduites. On a*

$$\langle v^{\otimes n}, \tilde{\gamma}_N^{(n)} v^{\otimes n}\rangle = \frac{(N+d-1)!}{(N+k+d-1)!}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}_s^N}\left[a(v)^n a^*(v)^n \Gamma_N\right] \tag{4.15}$$

pour tout $v \in \mathfrak{H}$.

Preuve. Il suffit de considérer le cas d'un état pur $\Gamma_N = |\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|$ et d'écrire

$$\begin{aligned}
\langle v^{\otimes k}, \widetilde{\gamma}_N^{(k)} v^{\otimes k}\rangle &= \dim \mathfrak{H}_s^N \int_{S\mathfrak{H}} du |\langle u^{\otimes N}, \Psi_N\rangle|^2 |\langle u^{\otimes k}, v^{\otimes k}\rangle|^2 \\
&= \dim \mathfrak{H}_s^N \int_{S\mathfrak{H}} du |\langle u^{\otimes (N+k)}, v^{\otimes k} \otimes \Psi_N\rangle|^2 \\
&= \frac{N!}{(N+k)!} \dim \mathfrak{H}_s^N \int_{S\mathfrak{H}} du |\langle u^{\otimes (N+k)}, a^*(v)^k \Psi_N\rangle|^2 \\
&= \frac{N!}{(N+k)!} \frac{\dim \mathfrak{H}_s^N}{\dim \mathfrak{H}_s^{N+k}} \langle a(v)^k \Psi_N, a(v)^k \Psi_N\rangle \\
&= \frac{(N+d-1)!}{(N+k+d-1)!} \langle \Psi_N, a(v)^k a^*(v)^k \Psi_N\rangle
\end{aligned}$$

en utilisant le lemme de Schur (4.5) dans $\mathfrak{H}_s^{N+k}$ à la troisième ligne, le fait que $a^*(v)$ est l'adjoint de $a(v)$ à la quatrième et en rappellant que

$$\dim \mathfrak{H}_s^N = \binom{N+d-1}{d-1}. \tag{4.16}$$

□

La marche à suivre est maintenant claire: il suffit de comparer des polynômes en $a^*(v)$ et $a(v)$ écrits dans les ordres normal et anti-normal. Cette opération standard mène au lemme final de la preuve:

[24] On rappelle que notre convention est $\mathrm{Tr}[\gamma_N^{(n)}] = 1$.

Lemme 4.6 (**Ordre normal et anti-normal**).
Soit $v \in S\mathfrak{H}$. On a

$$a(v)^n a^*(v)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \frac{n!}{k!} a^*(v)^k a(v)^k \text{ pour tout } n \in \mathbb{N}. \tag{4.17}$$

Proof. Pour faciliter le calcul il est utile de rappeller l'expression du n-ième polynôme de Laguerre

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \frac{(-1)^k}{k!} x^k.$$

Ces polynômes satisfont la relation de récurrence

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1)L_n(x) - xL_n(x) - nL_{n-1}(x)$$

et on peut voir que (4.17) se réécrit

$$a(v)^n a^*(v)^n = \sum_{k=0}^{n} c_{n,k}\, a^*(v)^k a(v)^k \tag{4.18}$$

où les $c_{n,k}$ sont les coefficients du polynôme

$$\tilde{L}_n(x) := n!\, L_n(-x).$$

Il suffit donc de montrer que

$$a(v)^{n+1} a^*(v)^{n+1} = a^*(v)a(v)^n a^*(v)^n a(v) + (2n+1)a(v)^n a^*(v)^n - n^2 a(v)^{n-1} a^*(v)^{n-1}$$

par une application répétée de la CCR (4.13). □

La formule (4.8) se déduit en combinant les Lemmes 4.4, 4.5 et 4.6 avec (4.14).

5. **Localisation dans l'espace de Fock et applications**

Nous nous tournons maintenant vers la première implication du schéma (3.44). Il va nous falloir convertir la convergence faible-$*$ des matrices densité en convergence forte pour pouvoir appliquer le Théorème 3.4. L'idée est de localiser l'état Γ_N de départ en utilisant soit des fonctions à support compact soit des projecteurs de rang fini. On peut alors travailler dans un cadre compact avec convergence $\mathfrak{S}^1$-forte, apppliquer le Théorème 3.4 et passer à la limite dans la localisation en dernière étape. Plus précisément nous utiliserons une localisation en dimension finie, pour bien montrer que le théorème général peut se déduire de la preuve constructive en dimension finie présentée au chapitre précédent.

La difficulté ici est que la notion de localisation appropriée pour un état à N corps (par exemple une fonction d'onde $\Psi_N \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$) est plus complexe que celle dont on a l'habitude pour des fonctions d'onde simples $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Il faut en fait travailler sur les matrices de densité directement, et localiser toutes les matrices réduites de telle façon que les matrices localisées correspondent à un état quantique. La procédure de localisation peut faire perdre des particules et donc l'état localisé ne sera en général pas un état à N corps mais une superposition d'états à k corps, $0 \leq k \leq N$, c'est à dire un état sur l'espace de Fock.

La procédure de localisation que nous utiliserons est décrite Section 5.2. Auparavant nous donnerons quelques considérations heuristiques à la Section 5.1 pour préciser ce que nous disions plus haut, à savoir que la notion de localisation correcte dans $L^2(\mathbb{R}^{dN})$ diffère de la localisation habituelle dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. La Section 5.3 contient la preuve du théorème de de Finetti faible et d'un résultat auxiliaire bien utile qui est une conséquence de la preuve par localisation.

5.1. **Convergence faible et localisation pour un état à deux corps.**

Les considérations ci-dessous sont tirées de [94]. Considérons une suite d' états bosoniques à deux corps particulièrement simple

$$\Psi_n := \psi_n \otimes_s \phi_n = \frac{1}{2}\psi_n \otimes \phi_n + \frac{1}{2}\phi_n \otimes \psi_n \in L^2_s(\mathbb{R}^{2d}), \psi_n, \phi_n \in L^2(\mathbb{R}^d) \tag{5.1}$$

qui correspond à avoir une particule dans l'état ψ_n et une particule dans l'état ϕ_n. On supposera

$$\langle \phi_n, \psi_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 0,$$

ce qui assure $\|\Psi_n\| = 1$. On pourra toujours supposer que

$$\Psi_n \rightharpoonup \Psi \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^{2d})$$

et la convergence est forte si et seulement si $\|\Psi\| = \|\Psi_n\| = 1$. Dans le cas où de la masse se perd à la limite, i.e. $\|\Psi\| < 1$ la convergence reste faible.

Nous travaillerons toujours dans un cadre localement compact et donc la seule source possible de perte de compacité est une fuite de masse à l'infini [118, 119, 120, 121]. Une possibilité est que les deux particules ϕ_n et ψ_n disparaissent à l'infini

$$\psi_n \rightharpoonup 0, \phi_n \rightharpoonup 0 \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^{2d}) \text{ quand } n \to \infty,$$

auquel cas $\Psi_n \rightharpoonup 0$ dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$. C'est dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ la possibilité la plus proche de la perte de masse simple dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, mais il existe d'autres possibilités dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Un cas typique est celui où seule une des deux particules part à l'infini, ce qu'on peut matérialiser par

$$\psi_n \rightharpoonup 0 \text{ faiblement dans } L^2(\mathbb{R}^d), \phi_n \to \phi \text{ fortement dans } L^2(\mathbb{R}^{2d}).$$

Pour la fuite de masse de ψ_n on peut typiquement penser à l'exemple

$$\psi_n = \psi\left(. + x_n\right) \tag{5.2}$$

avec $|x_n| \to \infty$ quand $n \to \infty$ et ψ disons régulier à support compact. On a dans ce cas

$$\Psi_n \rightharpoonup 0 \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^{2d})$$

mais pour des raisons physques évidentes on préférerait avoir une notion de convergence faible assurant

$$\Psi_n \rightharpoonup_g \frac{1}{2}\phi. \tag{5.3}$$

En effet, puisque seule la particule dans l'état ψ_n disparaît à l'infini, il est naturel que l'état limite soit un état à une particule décrit par ϕ, le $\frac{1}{2}$ représentant le fait que les particules originelles avaient chacune une chance sur deux d'être dans l'état qui disparaît à l'infini. Nous notons cette convergence $\rightharpoonup_g$ car il s'agit précisément de la convergence dite "géométrique" discutée par Mathieu Lewin dans [94]. La difficulté est bien sûr que les membres de droite et de gauche de (5.3) appartiennent à des espaces différents.

Pour introduire la notion de convergence correcte, il s'agit de regarder les matrices densité de Ψ_n:

$$\begin{aligned}
\gamma^{(2)}_{\Psi_n} &= |\phi_n \otimes_s \psi_n\rangle \langle \phi_n \otimes_s \psi_n| \rightharpoonup_* 0 \text{ dans } \mathfrak{S}^1\left(L^2(\mathbb{R}^{2d})\right) \\
\gamma^{(1)}_{\Psi_n} &= \frac{1}{2}|\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \frac{1}{2}|\psi_n\rangle\langle\psi_n| \rightharpoonup_* \frac{1}{2}|\phi\rangle\langle\phi| \text{ dans } \mathfrak{S}^1\left(L^2(\mathbb{R}^d)\right).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

On voit alors bien que la paire $\left(\gamma^{(2)}_{\Psi_n}, \gamma^{(1)}_{\Psi_n}\right)$ converge vers la paire $\left(0, \frac{1}{2}|\phi\rangle\langle\phi|\right)$ qui correspondent aux matrices de densité de l'état à un corps $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Plus précisément, la notion de convergence géométrique est une notion de convergence dans l'espace de Fock (ici bosonique à deux particules)

$$\mathcal{F}_s^{\leq 2}(L^2(\mathbb{R}^d)) := \mathbb{C} \oplus L^2(\mathbb{R}^d) \oplus L^2_s(\mathbb{R}^{2d}) \tag{5.5}$$

et on a au sens de la convergence géométrique sur $\mathfrak{S}^1\left(\mathcal{F}_s^{\leq 2}\right)$

$$0 \oplus 0 \oplus |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \rightharpoonup_g \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}|\phi\rangle\langle\phi| \oplus 0,$$

c'est à dire que toutes les matrices de densité réduites de l'état de gauche convergent vers celles de l'état de droite. On notera que la limite est bien de trace 1 dans $\mathfrak{S}^1\left(\mathcal{F}_s^{\leq 2}\right)$, il n'y a donc pas de perte de masse dans $\mathcal{F}_s^{\leq 2}$. Plus précisément, dans $\mathcal{F}_s^{\leq N}$ **la perte de masse pour un état à pur à N particules est matérialisée par la convergence vers un état mixte avec moins de particules.**

De la même façon que la convergence faible adaptée aux problèmes à N corps n'est pas la convergence faible $L^2(\mathbb{R}^{dN})$ usuelle (a fortiori quand on prendra la limite $N \to \infty$), la bonne procédure pour localiser un état et ainsi transformer la convergence faible en convergence forte doit être repensée. Etant donné un opérateur de localisation auto-adjoint positif A, disons $A = P$ un projecteur de rang fini ou $A = \chi$ la mutliplication par

une fonction χ à support compact, on localise usuellement une fonction d'onde $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ en introduisant

$$\psi_A = A^2\psi$$

ce qui correspond à faire l'association

$$|\psi\rangle\langle\psi| \leftrightarrow |A\psi\rangle\langle A\psi|\,.$$

En imitant cette procédure pour l'état à deux particules (5.1) on pourrait imaginer considérer l'état localisé défini par sa matrice densité à deux corps

$$\gamma^{(2)}_{n,A} = |A\otimes A\Psi_n\rangle\langle A\otimes A\Psi_n|\,.$$

Il est alors clair que

$$\gamma^{(2)}_{n,A} \rightharpoonup_* 0 \text{ dans } \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^2_s),$$

ce à quoi il fallait s'attendre, mais il est plus grave que l'on ait également pour la matrice à un corps correspondante

$$\gamma^{(1)}_{n,A} \rightharpoonup_* 0 \text{ dans } \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H})$$

alors, que au vu de (5.4) on voudrait avoir

$$\gamma^{(1)}_{n,A} \to \frac{1}{2}\,|A\phi\rangle\langle A\phi| \text{ fortement dans } \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}).$$

La solution à ce dilemme est de définir un état localisé en demandant que ses matrices de densité reduites soient $A\otimes A\gamma^{(2)}_{\Psi_n}A\otimes A$ et $A\gamma^{(1)}_{\Psi_n}A$. L'état correspondant est alors uniquement déterminé, et il se trouve qu'il s'agit d'un état sur l'espace de Fock, comme nous l'expliquons à la section suivante.

5.2. **Localisation dans l'espace de Fock.**

Après les considérations heuristiques précédentes, nous introduisons maintenant la notion de localisation dans l'espace de Fock bosonique[25]

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_s(\mathfrak{H}) &= \mathbb{C}\oplus\mathfrak{H}\oplus\ldots\oplus\mathfrak{H}^n_s\oplus\ldots\\ \mathcal{F}_s(L^2(\mathbb{R}^d)) &= \mathbb{C}\oplus L^2(\mathbb{R}^d)\oplus\ldots\oplus L^2_s(\mathbb{R}^{dn})\oplus\ldots.\end{aligned} \tag{5.6}$$

Dans le cadre de ce cours nous partirons toujours d'états à N corps, auquel cas il est suffisant de travailler dans l'espace de Fock tronqué

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^{\leq N}_s(\mathfrak{H}) &= \mathbb{C}\oplus\mathfrak{H}\oplus\ldots\oplus\mathfrak{H}^n_s\oplus\ldots\oplus\mathfrak{H}^N_s\\ \mathcal{F}^{\leq N}_s(L^2(\mathbb{R}^d)) &= \mathbb{C}\oplus L^2(\mathbb{R}^d)\oplus\ldots\oplus L^2_s(\mathbb{R}^{dn})\oplus\ldots\oplus L^2_s(\mathbb{R}^{dN}).\end{aligned} \tag{5.7}$$

Définition 5.1 (**Etats bosoniques sur l'espace de Fock**)**.**
Un état sur l'espace de Fock est un opérateur auto-adjoint positif de trace 1 sur $\mathcal{F}_s$. On notera $\mathcal{S}(\mathcal{F}_s(\mathfrak{H}))$ l'ensemble des états (bosoniques ici)

$$\mathcal{S}(\mathcal{F}_s(\mathfrak{H})) = \left\{\Gamma\in\mathfrak{S}^1(\mathcal{F}_s(\mathfrak{H})), \Gamma=\Gamma^*, \Gamma\geq 0, \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}_s(\mathfrak{H})}[\Gamma]=1\right\}. \tag{5.8}$$

On dira qu'un état est diagonal (stricto sensu, diagonal par blocs) si il peut s'écrire

$$\Gamma = G_0\oplus G_1\oplus\ldots\oplus G_n\oplus\ldots \tag{5.9}$$

[25]La procédure est la même pour des particules fermioniques.

avec $G_n \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}_s^n)$. Un état Γ_N sur l'espace de Fock tronqué $\mathcal{F}_s^{\leq N}(\mathfrak{H})$, respectivement un état diagonal sur l'espace de Fock tronqué se définissent de la même manière. Pour un état diagonal sur $\mathcal{F}_s^{\leq N}(\mathfrak{H})$ de la forme

$$\Gamma = G_{0,N} \oplus G_{1,N} \oplus \ldots \oplus G_{N,N},$$

sa n-ième matrice de densité réduite $\Gamma_N^{(n)}$ est l'opérateur sur $\mathfrak{H}_s^n$ donné par

$$\Gamma_N^{(n)} = \binom{N}{n}^{-1} \sum_{k=n}^{N} \binom{k}{n} \operatorname{Tr}_{n+1\to k} G_{N,k}. \tag{5.10}$$

□

Le lecteur habitué à ces concepts notera deux choses:

- Nous introduisons uniquement les concepts qui nous seront indispensables par la suite. On peut bien sûr définir les matrices réduites d'états généraux, mais nous ne nous en servirons pas par la suite. Pour un état diagonal, la donnée des matrices réduites (5.10) caractérisent complètement l'état. Pour un état non diagonal il faut aussi spécifier ses matrices "hors-diagonales" $\Gamma^{(p,q)} : \mathfrak{H}_s^p \mapsto \mathfrak{H}_s^q$ pour $p \neq q$.
- La normalisation choisie dans (5.10) n'est pas standard. Elle est choisie pour que, dans l'esprit du reste du cours, la n-ième matrice réduite d'un état à N particules (i.e. avec $G_{0,N} = \ldots = G_{N-1,N} = 0$ dans (5.10)) soit de trace 1. La convention standard serait plutôt qu'elle soit de trace $\binom{N}{n}$, ce qui est moins pratique pour appliquer le Théorème 3.4.

Nous pouvons maintenant introduire le concept de localisation d'un état. Nous nous limiterons aux états à N corps et aux opérateurs de localisation auto-adjoints, ce qui est suffisant pour nos besoins dans la suite. Le lemme/définition suivant est tiré de [94], on pourra en trouver d'autres versions par exemple dans [2, 48, 77].

Lemme 5.2 (**Localisation d'un état à N corps**).
Soit $\Gamma_N \in \mathcal{S}(\mathfrak{H}_s^N)$ un état bosonique à N corps et A un opérateur auto-adjoint sur $\mathfrak{H}$ avec $0 \leq A^2 \leq 1$. Il existe un unique état diagonal $\Gamma_N^A \in \mathcal{S}(\mathcal{F}_s^{\leq N}(\mathfrak{H}))$ tel que

$$\left(\Gamma_N^A\right)^{(n)} = A^{\otimes n} \Gamma_N^{(n)} A^{\otimes n} \tag{5.11}$$

pour tout $0 \leq n \leq N$. De plus, en écrivant Γ_N^A sous la forme

$$\Gamma_N^A = G_{0,N}^A \oplus G_{1,N}^A \oplus \ldots \oplus G_{N,N}^A,$$

on a la relation fondamentale

$$\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}_s^n}\left[G_{N,n}^A\right] = \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}_s^{N-n}}\left[G_{N,N-n}^{\sqrt{1-A^2}}\right]. \tag{5.12}$$

Remarque 5.3 (Localisation dans l'espace de Fock).

(1) La partie unicité du lemme montre bien qu'on ne peut faire l'économie de travailler sur l'espace de Fock. L'état localisé est en fait unique dans $\mathcal{S}(\mathcal{F}_s(\mathfrak{H}))$, mais pour le voir il faudrait introduire des définitions un peu plus générales, cf [94].
(2) La relation (5.12) est une des pierres angulaires de la méthode. En langage informel elle exprime le fait, que dans l'état Γ_N, **la probabilité d'avoir n particules A-localisées est égale à la probabilité d'avoir $N-n$ particules $\sqrt{1-A^2}$**

localisées. Pensons au cas d'une fonction de localisation particulièrement simple, $A = \mathbb{1}_{B(0,R)}$, la fonction indicatrice de la boule de rayon R. Nous disons alors simplement que la probabilité d'avoir n particules dans la boule égale la probabilité d'avoir $N-n$ particules hors de la boule. □

Preuve du Lemme 5.2. L'unicité (en tous cas parmi les états diagonaux de l'espace de Fock tronqué) est une simple conséquence du fait que les matrices densité définissent uniquement l'état. On pourra voir les détails dans [94].

Pour l'existence on peut utiliser l'identification usuelle

$$\mathcal{F}_s(A\mathfrak{H} \oplus \sqrt{1-A^2}\mathfrak{H}) \simeq \mathcal{F}_s(A\mathfrak{H}) \otimes \mathcal{F}_s(\sqrt{1-A^2}\mathfrak{H})$$

et définir l'état localisé en prenant une trace partielle par rapport au deuxième espace dans le produit tensoriel du membre de droite. Nous allons suivre une route plus explicite mais équivalente. Pour simplifier les notations nous nous limitons au cas où $A = P$ est un projecteur orthogonal et donc $\sqrt{1-A^2} = P_\perp$.

Par définition et cyclicité de la trace on obtient

$$\begin{aligned} P^{\otimes n}\Gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} &= \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[P^{\otimes n}\otimes \mathbb{1}^{\otimes(N-n)}\Gamma_N P^{\otimes n}\otimes \mathbb{1}^{\otimes(N-n)}\right] \\ &= \sum_{k=0}^{N-n}\binom{N-n}{k}^2 \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[P^{\otimes n+k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-n-k)}\Gamma_N P^{\otimes n+k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-n-k)}\right] \\ &= \sum_{k=n}^{N}\binom{N-n}{k-n}^2 \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\Gamma_N P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\right] \end{aligned}$$

en écrivant $\mathbb{1} = P + P_\perp$ et en développant les termes $\mathbb{1}^{\otimes(N-n)}$ par la formule du binôme. Il suffit ensuite de noter que

$$\binom{N-n}{k-n}^2 = \binom{N}{k}^2\binom{N}{n}\binom{k}{n}^{-1}$$

pour obtenir

$$P^{\otimes n}\Gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} = \sum_{k=n}^{N}\binom{N}{n}^{-1}\binom{k}{n}\mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[G_{N,k}^P\right] = \left(G_N^P\right)^{(n)}$$

avec (cf la définition (5.10))

$$G_{N,k}^P = \binom{N}{k}^2 \mathrm{Tr}_{k+1\to N}\left[P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\Gamma_N P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\right] \tag{5.13}$$

et

$$G_N^P = G_{N,0}^P \oplus \ldots \oplus G_{N,N}^P.$$

Il reste à montrer que G_N^P est bien un état, c'est-à-dire que sa trace vaut 1. Pour le voir il suffit d'écrire

$$\begin{aligned}1 &= \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N}[\Gamma_N] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N}\left[(P+P_\perp)^{\otimes N}\,\Gamma_N\,(P+P_\perp)^{\otimes N}\right]\\ &= \sum_{k=0}^N \binom{N}{k}^2 \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N}\left[P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\Gamma_N P^{\otimes k}\otimes P_\perp^{\otimes(N-k)}\right]\\ &= \sum_{k=0}^N \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^P\right] = \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathfrak{H})}[G_N^P].\end{aligned}$$

La relation (5.12) est une conséquence immédiate de (5.13) et de la symétrie de Γ_N. □

5.3. **Preuve du théorème de de Finetti faible et corollaires.**

Nous allons maintenant utiliser la procédure de localisation que nous venons de décrire pour démontrer la première implication du schéma (3.44). L'idée est d'utiliser un projecteur de rang fini P et d'utiliser (5.10) avec (5.11) pour écrire (avec $n \in \mathbb{N}$ fixe)

$$\begin{aligned}P^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} &= \sum_{k=n}^N \binom{N}{n}^{-1}\binom{k}{n}\,\mathrm{Tr}_{n+1\to k}\,G_{N,k}^P\\ &\approx \sum_{k=n}^N \left(\frac{k}{N}\right)^n \mathrm{Tr}_{n+1\to k}\,G_{N,k}^P \qquad (5.14)\end{aligned}$$

en utilisant l'estimation simple (voir le calcul dans [96], Equation (2.13))

$$\binom{N}{n}^{-1}\binom{k}{n} = \left(\frac{k}{N}\right)^n + O(N^{-1}). \qquad (5.15)$$

Le raisonnement est alors le suivant: les termes où k est petit contribuent très peu à la somme (5.14) à cause du facteur $\left(\frac{k}{N}\right)^n$. Pour les termes où k est grand, on note que, à normalisation près, $G_{N,k}^P$ est un état bosonique à k particules sur $P\mathfrak{H}$. On peut donc lui appliquer le théorème de de Finetti discuté au Chapitre 4, sans se soucier d'une éventuelle perte de compacité dans la limite $N\to\infty$ puisque $P\mathfrak{H}$ est de dimension finie. Comme k est grand dans ces termes et n est fixe, on obtient (toujours formellement)

$$\mathrm{Tr}_{n+1\to k}\,G_{N,k}^P \approx \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}[G_{N,k}^P]\int_{u\in SP\mathfrak{H}} d\nu_k(u)|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|$$

pour une certaine mesure ν_k, et donc

$$P^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} \approx \sum_{k\simeq N}^N \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}[G_{N,k}^P]\left(\frac{k}{N}\right)^n\int_{u\in SP\mathfrak{H}} d\nu_k(u)|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|.$$

Dans la limite $N\to\infty$, la somme discrète devient une intégrale en $\lambda = k/N$, et en utilisant le fait que G_N^P est un état pour gérer la normalisation il est naturel d'espérer obtenir

$$P^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} \approx \int_0^1 d\lambda\,\lambda^n\int_{u\in SP\mathfrak{H}} d\nu_\lambda(u)|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|$$

ce qu'on peut réécrire sous la forme (3.23) en définissant (en coordonnées "radiales" sur la boule unité $BP\mathfrak{H}$)

$$d\mu(u) = d\mu\left(\|u\|, \frac{u}{\|u\|}\right) := d\|u\|^2 \times d\nu_{\|u\|^2}\left(\frac{u}{\|u\|}\right)$$

Il restera en dernière étape à appliquer cette procédure pour une suite de projecteurs $P_\ell \to \mathbb{1}$ et à vérifier quelques relations de compatibilité pour conclure. La mesure finale peut ne pas être une probabilité, ce qu'on peut compenser en rajoutant un delta à l'origine puisque cette opération ne change aucune des formules précédentes.

On notera que (modulo quelques passages à la limite), cette preuve qui combine les méthodes présentées au Chapitre 4 et à la Section 5.2 donne une recette pour constuire la mesure de de Finetti "à la main", ce qui est bien utile en pratique, voir Chapitres 6 et 7. L'esprit de la preuve par localisation rappelle certains aspects de la méthode de Ammari et Nier [3, 4].

Passons maintenant à une preuve rigoureuse, suivant [96, Section 2].

Preuve du Théorème 3.6. On continue avec les notations ci-dessus. On définit $M_{P,N}^{(n)}$ une mesure sur $[0,1]$, à valeurs dans les matrices positives hermitiennes de taille $\dim\left(\otimes_s^n (P\mathfrak{H})\right)$ par la formule suivante:

$$\mathrm{d}M_{P,N}^{(n)}(\lambda) := \sum_{k=n}^{N} \delta_{k/N}(\lambda)\ \mathrm{Tr}_{n+1\to k}\, G_{N,k}^P.$$

On a alors, en utilisant (5.15)

$$\mathrm{Tr}\left| P^{\otimes n}\gamma_{\Gamma_N}^{(n)}P^{\otimes n} - \int_0^1 \lambda^n\, \mathrm{d}M_{P,N}^{(n)}(\lambda)\right| \leq \frac{C}{N}\sum_{k=n}^{N} \mathrm{Tr}\, G_{N,k}^P \to 0 \text{ quand } N\to\infty. \tag{5.16}$$

Comme P est un projecteur de rang fini et $\gamma_N^{(n)}$ converge faible-$*$ par hypothèse,

$$P^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}P^{\otimes n} \to P^{\otimes n}\gamma^{(n)}P^{\otimes n} \tag{5.17}$$

fortement en norme de trace. D'autre part,

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[\int_0^1 \mathrm{d}M_{P,N}^{(n)}(\lambda)\right] = \sum_{k=n+1}^{N} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\, G_{N,k}^P \leq \sum_{k=0}^{N} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\, G_{N,k}^P = 1,$$

donc $M_{P,N}^{(n)}$ est une suite de mesures positives bornées sur un espace de dimension fini compact (les matrices hermitiennes positives de taille $\dim P\mathfrak{H}$ ayant une trace plus petite que 1). On peut donc en extraire une sous-suite convergeant faiblement au sens des mesures vers $M_P^{(n)}$. En combinant avec (5.16) et (5.17) on a

$$P^{\otimes n}\gamma^{(n)}P^{\otimes n} = \int_0^1 \lambda^n\, \mathrm{d}M_P^{(n)}(\lambda). \tag{5.18}$$

Il s'agit maintenant de voir que la suite de mesures $\left(M_P^{(n)}\right)_{n\in\mathbb{N}}$ que l'on vient d'obtenir est consistante au sens où ,pour $n\geq 0$,

$$\int_0^1 f(\lambda)\,\mathrm{Tr}_{n+1}\, dM_P^{(n+1)}(\lambda) = \int_0^1 f(\lambda) dM_P^{(n)}(\lambda) \tag{5.19}$$

pour tout fonction continue f sur $[0,1]$ s'annulant en 0, avec Tr_{n+1} la trace partielle par rapport à la dernière variable. On a

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{n+1}\, dM_{P,N}^{(n+1)}(\lambda) &= \sum_{k=n+1}^{N} \delta_{k/N}(\lambda)\ \mathrm{Tr}_{n\to k}\, G_{N,k} \\ &= dM_{P,N}^{(n)}(\lambda) - \delta_{n/N}(\lambda) G_{N,n}^{P}\end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(\lambda)\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left|\mathrm{Tr}_{n+1}\, M_{P,N}^{(n+1)}(\lambda) - M_{P,N}^{(n)}(\lambda)\right| &\leq \int_0^1 f(\lambda)\delta_{n/N}(\lambda)\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\, G_{N,n}^{P} \\ &\leq f\left(\frac{n}{N}\right)\end{aligned}$$

puisque $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n} G_{N,n}^{P} \leq 1$. En passant à la limite on obtient bien (5.19) pour toute fonction f telle que $f(0) = 0$.

Nous appliquons maintenant le Théorème 3.4 en dimension finie. Stricto sensu, il ne s'applique que à λ fixe, mais en approchant $dM_P^{(n)}$ par des fonctions étagées puis en passant à la limite, on obtient une mesure ν_P sur $[0,1] \times S\mathfrak{H} \cap (P\mathfrak{H})$ telle que

$$\int_0^1 f(\lambda)\mathrm{d}M_P^{(n)}(\lambda) = \int_{S\mathfrak{H}} \int_0^1 f(\lambda) d\nu_P(\lambda,u) |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|$$

pour toute fonction continue f s'annulant en 0. On a donc maintenant

$$\begin{aligned}P^{\otimes n}\gamma^{(n)}P^{\otimes n} &= \int_0^1 \int_{S\mathfrak{H}} d\nu_P(\lambda,u)\,\lambda^n |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \\ &= \int_0^1 \int_{S\mathfrak{H}} d\nu_P(\lambda,u)\,|(\sqrt{\lambda}u)^{\otimes n}\rangle\langle(\sqrt{\lambda}u)^{\otimes n}| \\ &= \int_{B\mathfrak{H}} d\mu_P(u)|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|\end{aligned}$$

en définissant la mesure μ_P en coordonnées radiales. On est libre de rajouter une masse de Dirac à l'origine pour faire de μ_P une mesure de probabilité.

L'argument peut-être appliqué à une suite de projecteurs de rang fini convergeant vers l'identité. On a alors une suite de probabilités μ_k sur $B\mathfrak{H}$ telles que

$$P_k^{\otimes n}\gamma^{(n)}P_k^{\otimes n} = \int_{B\mathfrak{H}} d\mu_k(u)\,|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|.$$

En prenant une suite croissante de projecteurs (i.e. satisfaisant $P_k\mathfrak{H} \subset P_{k+1}\mathfrak{H}$) il est clair que μ_k coïncide avec μ_ℓ sur $P_\ell\mathfrak{H}$ pour $\ell \leq k$. Comme toutes ces mesures ont leur support dans un ensemble borné, il existe (voir par exemple [158, Lemme 1]) une unique mesure de probabilité[26] μ sur $B\mathfrak{H}$ qui coïncide avec μ_k sur $P_k\mathfrak{H}$ au sens où:

$$\int_{B\mathfrak{H}} d\mu_k(u)\,|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| = \int_{B\mathfrak{H}} d\mu(u)\,|(P_k u)^{\otimes n}\rangle\langle(P_k u)^{\otimes n}|.$$

[26]Pour la construire, noter que la σ-fermeture de l'union pour $k \geq 0$ des boréliens de $P_k\mathfrak{H}$ coïncide avec les boréliens de $\mathfrak{H}$.

On conclut donc

$$P_k^{\otimes n}\gamma^{(n)}P_k^{\otimes n} = P_k^{\otimes n}\left(\int_{B\mathfrak{H}} d\mu(u)\,|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|\right)P_k^{\otimes n}$$

et il ne reste plus qu'à prendre la limite $k \to \infty$ pour obtenir l'existence de la mesure satisfaisant (3.23). La preuve d'unicité est omise. □

Nous donnons maintenant un cas particulier, adapté aux besoins de la suite des notes, d'un corollaire bien utile de la méthode de preuve ci-dessus (voir [96, Théorème 2.6] pour l'énoncé général):

Corollaire 5.4 (**Localisation et mesure de de Finetti**).
Soit (Γ_N) *une suite d'états à* N *corps sur* $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ *satisfaisant les hypothèse du Théorème 3.6 et* μ *la mesure de de Finetti associée. Supposons que*

$$\mathrm{Tr}\left[-\Delta\gamma_N^{(1)}\right] = \mathrm{Tr}\left[|\nabla|\gamma_N^{(1)}|\nabla|\right] \leq C \tag{5.20}$$

pour une constante indépendante de N. *Soit* χ *une fonction de localisation à support compact avec* $0 \leq \chi \leq 1$ *et* G_N^χ *l'état localisé défini par le Lemme 5.2. Alors*

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N} f\left(\frac{k}{N}\right)\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\, G_{N,k}^\chi = \int_{B\mathfrak{H}} d\mu(u)\; f(\|\chi u\|^2) \tag{5.21}$$

pour toute fonction continue f *sur* $[0,1]$.

Peuve du Corollaire 5.4. Par densité des polynômes dans les fonctions continues sur $[0,1]$ il suffit de considérer le cas $f(\lambda) = \lambda^n$ avec $n = 0, 1, ...$ On utilise alors (5.10), (5.11) et (5.15) à nouveau pour écrire

$$\left|\sum_{k=0}^{N}\left(\frac{k}{N}\right)^n \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\, G_{N,k}^\chi - \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[\chi^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}\chi^{\otimes n}\right]\right| \to 0 \text{ quand } N \to \infty.$$

L'hypothèse (5.20) assure que

$$\mathrm{Tr}\left[\left(\sum_{j=1}^{n} -\Delta_j\right)\gamma_N^{(n)}\right] \leq Cn$$

et on peut donc supposer que

$$\left(\sum_{j=1}^{n}|\nabla|_j\right)\gamma_N^{(n)}\left(\sum_{j=1}^{n}|\nabla|_j\right) \rightharpoonup_\star \left(\sum_{j=1}^{n}|\nabla|_j\right)\gamma^{(n)}\left(\sum_{j=1}^{n}|\nabla|_j\right) \text{ quand } N \to \infty.$$

L'opérateur de multiplication par χ est relativement compact par rapport au Laplacien, donc

$$D_n^\chi := \chi^{\otimes n}\left(\sum_{j=1}^{n}|\nabla|_j\right)^{-1}$$

est un opérateur compact. On a alors

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[\chi^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}\chi^{\otimes n}\right] &= \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[D_n^\chi\left(\sum_{j=1}^n|\nabla|_j\right)\gamma_N^{(n)}\left(\sum_{j=1}^n|\nabla|_j\right)D_n^\chi\right]\\ &\to \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[D_n^\chi\left(\sum_{j=1}^n|\nabla|_j\right)\gamma^{(n)}\chi^{\otimes n}\left(\sum_{j=1}^n|\nabla|_j\right)D_n^\chi\right]\\ &= \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[\chi^{\otimes n}\gamma^{(n)}\chi^{\otimes n}\right].\end{aligned}$$

On conclut alors en utilisant (3.23) que

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^N\left(\frac{k}{N}\right)^n\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}G_{N,k}^\chi &\to \int_{B\mathfrak{H}}d\mu(u)\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left[|(\chi u)^{\otimes n}\rangle\langle(\chi u)^{\otimes n}|\right]\\ &= \int_{B\mathfrak{H}}d\mu(u)\,\|\chi u\|^{2n} = \int_{B\mathfrak{H}}d\mu(u)f(\|\chi u\|^2).\end{aligned}$$

□

Remarque 5.5 (Mesure de de Finetti faible et perte de masse.).

(1) L'hypothèse (5.20) est là pour assurer la compacité locale des matrices de densité, cf la preuve. Elle est bien sûr très naturelle pour les applications que nous visons (énergie cinétique uniformément bornée). La convergence (5.21) signifie que la masse de la mesure de de Finetti μ sur la sphère $\{\|u\|^2=\lambda\}$ correspond à la probabilité qu'une fraction λ des particules ne s'échappe pas à l'infini.

(2) Nous utiliserons ce corollaire pour déduire des informations sur les particules qui s'échappent à l'infini de la façon suivante. On définit la fonction

$$\eta=\sqrt{1-\chi^2}$$

qui "localise près de l'infini". On ne peut bien sûr pas appliquer le résultat directement à l'état localisé G_N^η mais on peut utiliser la relation (5.12) pour obtenir

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^N f\left(\frac{k}{N}\right)\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}G_{N,k}^\eta &= \lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^N f\left(1-\frac{k}{N}\right)\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}G_{N,k}^\chi\\ &= \int_{B\mathfrak{H}}d\mu(u)\;f\left(1-\|\chi u\|^2\right),\end{aligned}\tag{5.22}$$

ce qui fournit un certain contrôle sur la perte de masse à l'infini, encodé par la mesure de de Finetti qui pourtant décrit par définition les particules qui restent piégées. Typiquement, on appliquera (5.22) avec $f(\lambda)\simeq e_{\mathrm{H}}(\lambda)$, l'énergie de Hartree à masse λ, voir le chapitre suivant.

□

6. **Dérivation de la théorie de Hartree: cas général**

On se tourne maintenant vers le cas général de l'obtention de la fonctionnelle de Hartree comme limite du problème à N corps dans le régime de champ moyen. Au Chapitre 3 nous avons vu que sous des hypothèses physiques simplificatrices, le résultat était une conséquence assez directe des théorèmes de de Finetti faible et fort. Le cas général demande une discussion plus poussée et nous serons amenés à utiliser pleinement les outils de localisation dans l'espace de Fock introduits au Chapitre 5.

Le cadre est maintenant celui de particules dans un potentiel V non piégeant interagissant via un potentiel d'interaction qui peut potentiellement avoir des états liés. Rappellons les notations: le Hamiltonien du sytème complet est

$$H_N^V = \sum_{j=1}^N T_j + \frac{1}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq N} w(x_i - x_j), \tag{6.1}$$

agissant sur l'espace de Hilbert $\mathfrak{H}_s^N = \bigotimes_s^N \mathfrak{H}$, avec $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$. Le Hamiltonien à un corps est

$$T = -\Delta + V, \tag{6.2}$$

que l'on suppose auto-adjoint et borné inférieurement. Nous avons spécifié la présence du potentiel V dans la notation (6.1) car nous serons amenés à considérer le système pour les particules perdues à l'infini décrit par le Hamiltonien H_N^0 où on prend $V \equiv 0$. On peut faire les mêmes généralisations que celles mentionnées à la Remarque 3.1 mais nous ne traiterons explicitement que le cas modèle ci-dessus.

Le potentiel d'interaction $w : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ sera relativement borné par rapport à T:

$$-\beta_-(T_1 + T_2) - C \leq w(x_1 - x_2) \leq \beta_+(T_1 + T_2) + C, \tag{6.3}$$

symétrique

$$w(-x) = w(x),$$

et décroissant à l'infini

$$w \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d), \max(1, d/2) < p < \infty \to 0, w(x) \to 0 \text{ quand } |x| \to \infty. \tag{6.4}$$

Ceci assure que H_N est auto-adjoint et borné inférieurement. A nouveau, il est assez vain de considérer des potentiels à un corps partiellement confinants et donc on supposera que V n'est piégeant dans aucune direction:

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d), \max 1, d/2 \leq p < \infty, V(x) \to 0 \text{ quand } |x| \to \infty. \tag{6.5}$$

L'énergie fondamentale de (3.1) est toujours donnée par

$$E^V(N) = \inf \sigma_{\mathfrak{H}^N} H_N^V = \inf_{\Psi\in\mathfrak{H}^N, \|\Psi\|=1} \left\langle \Psi, H_N^V \Psi \right\rangle_{\mathfrak{H}^N}. \tag{6.6}$$

Enfin, rappellons les objets limites. La fonctionnelle de Hartree avec le potentiel V est donnée par

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}^V[u] := \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + V|u|^2 + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 w(x-y) |u(y)|^2 dxdy \tag{6.7}$$

et on utilisera la notation $\mathcal{E}^0_{\rm H}$ pour la fonctionnelle invariante par translation où $V \equiv 0$. L'énergie Hartree à masse λ est donnée par

$$e^V_{\rm H}(\lambda) := \inf_{\|u\|^2=\lambda} \mathcal{E}^V_{\rm H}[u], 0 \leq \lambda \leq 1. \tag{6.8}$$

Sous les hypothèses ci-dessus on aura toujours l'inégalité de liaison large

$$e^V_{\rm H}(1) \leq e^V_{\rm H}(\lambda) + e^0_{\rm H}(1-\lambda) \tag{6.9}$$

qui se prouve aisément en évaluant l'énergie d'une suite de fonctions avec une masse λ dans le puits de potentiel de V et une masse $1-\lambda$ s'échappant à l'infini. Nous allons démontrer le théorème suivant, issu de [96] (cas particulier du Théorème 1.1).

Théorème 6.1 (**Dérivation de la théorie de Hartree, cas général**).
Sous les hypothèses précédentes on a les résultats suivants:

(*i*) *Convergence de l'énergie.*

$$\boxed{\lim_{N\to\infty} \frac{E^V(N)}{N} = e^V_{\rm H}(1).} \tag{6.10}$$

(*ii*) *Convergence des états. Soit une suite Ψ_N normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^{dN})$ de quasi-minimiseurs pour H^V_N:*

$$\left\langle \Psi_N, H^V_N \Psi_N \right\rangle = E^V(N) + o(N) \text{ quand } N \to \infty, \tag{6.11}$$

et $\gamma^{(k)}_N$ les matrices de densité réduites correspondantes. Il existe $\mu \in \mathcal{P}(B\mathfrak{H})$ une probabilité sur la boule unité de $\mathfrak{H}$ avec $\mu(\mathcal{M}^V) = 1$ où

$$\mathcal{M}^V = \Big\{ u \in B\mathfrak{H} \ : \ \mathcal{E}^V_{\rm H}[u] = e^V_H(\|u\|^2) = e^V_H(1) - e^0_H(1-\|u\|^2) \Big\}, \tag{6.12}$$

telle que, le long d'une sous-suite

$$\boxed{\gamma^{(k)}_{N_j} \rightharpoonup_* \int_{\mathcal{M}^V} |u^{\otimes k}\rangle\langle u^{\otimes k}| \, d\mu(u)} \tag{6.13}$$

faiblement-$*$ dans $\mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^k)$, pour tout $k \geq 1$.

(*iii*) *Si de plus on a l'inégalité de liaison stricte*

$$e^V_{\rm H}(1) < e^V_{\rm H}(\lambda) + e^0_{\rm H}(1-\lambda) \tag{6.14}$$

pour tout $0 \leq \lambda < 1$, la mesure μ est à support dans la sphère $S\mathfrak{H}$ et la limite (6.13) *a lieu en norme de trace. En particulier, si $e^V_{\rm H}(1)$ a un minimiseur u_H unique à une phase près, alors on a pour toute la suite*

$$\boxed{\gamma^{(k)}_N \to |u^{\otimes k}_H\rangle\langle u^{\otimes k}_H| \text{ fortement dans } \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H}^k)} \tag{6.15}$$

pour tout $k \geq 1$ fixe.

La preuve se fait en deux étapes. Dans un premier temps (Section 6.1) on considère le cas complètement invariant par translations où $V \equiv 0$, qui décrira les particules s'échappant loin du puits de potentiel de V dans le cas général. On montre que l'énergie $e^0_{\rm H}(1)$ est bien la limite de $N^{-1}E^0(N)$. Dans ce cas on ne peut espérer beaucoup plus puisqu'il existe toujours des suites minimisantes dont toutes les matrices de densité convergent vers 0 en norme de trace. En plus des outils déjà décrits on utilisera une idée de Lieb, Thirring et Yau [114, 115] pour récupérer un peu de compacité.

On utilise ensuite pleinement les méthodes de localisation du Chapitre 5 pour traiter le cas général (Section 6.2). Dans l'esprit du principe de concentration-compacité on localisera les suites minimisantes à l'intérieur et l'extérieur d'une boule. La partie localisée à l'intérieur de la boule est décrite par la limite faible-$*$ des matrices de densité pour lesquelles on peut utiliser le théorème de de Finetti faible. La partie localisée à l'extérieur de la boule ne verra plus le potentiel V et on pourra donc lui appliquer les résultats de la Section 6.1.

6.1. **Le problème invariant par translation.**

On traite ici le cas particulier où $V \equiv 0$. Dans ce cas il est possible de construire des de quasi-minimiseurs (au sens de (6.11)) pour $E^0(N)$ avec $\gamma_N^{(1)}(. - y_N) \rightharpoonup_* 0$ pour toute suite de translations x_N. On peut donc avoir *évanescence* dans la terminologie de Lions [118, 119] et sans travail spécifique on ne peut espérer mieux que la convergence de l'énergie. En effet, il est possible de construire un état où le mouvement relatif des particules est lié par le potentiel d'interaction w mais où il y a évanescence pour le centre de masse, ce qui entraîne l'évanescence de la suite. On se contentera donc de prouver la convergence de l'énergie:

Théorème 6.2 (**Systèmes invariants par translation**).
Sous les hypothès précédentes on a

$$\boxed{\lim_{N\to\infty} \frac{E^0(N)}{N} = e^0_{\rm H}(1).} \tag{6.16}$$

La première étape consiste à utiliser une partie du potentiel d'interaction pour créer un potentiel à un corps attractif (grosso-modo cela revient à retirer le degré de liberté du centre de masse). Ceci définira un problème auxilaire dont l'énergie est proche du système de départ, mais pour lequel les particules resteront toujours piégées. Ceci est l'objet du lemme suivant qui est inpiré par les travaux [114, 115]:

Lemme 6.3 (**Problème auxilaire avec liaison**).
On sépare $w = w^+ - w^-$ en partie positive et négative et on définit pour un certain $\varepsilon > 0$

$$w_\varepsilon(x) = w(x) + \varepsilon w^-(x).$$

Soit le Hamiltonien auxiliaire

$$H_N^\varepsilon = \sum_{i=1}^N \Big(K_i - \varepsilon w_-(x_i)\Big) + \frac{1}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq} w_\varepsilon(x_i - x_j) \tag{6.17}$$

et $E^\varepsilon(N)$ l'énergie fondamentale associée. On a alors

$$a_\varepsilon := \lim_{N\to\infty} \frac{E^\varepsilon(N)}{N} \leq \lim_{N\to\infty} \frac{E^0(N)}{N} =: a. \tag{6.18}$$

Preuve. Pour tout $\Psi \in L^2_s(\mathbb{R}^{dN})$ on peut écrire en utilisant la symétrie

$$\left\langle \Psi, \left(\sum_{i=1}^{N} -\Delta_i \right) \Psi \right\rangle = \frac{N}{N-1} \left\langle \Psi, \left(\sum_{i=1}^{N-1} -\Delta_i \right) \Psi \right\rangle .$$

De la même façon

$$\frac{2}{N(N-1)} \left\langle \Psi, \sum_{1\leq i<j}^{N} w(x_i - x_j)\Psi \right\rangle = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w\gamma^{(2)}_\Psi] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w_\varepsilon \gamma^{(2)}_\Psi] - \varepsilon \,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w^- \gamma^{(2)}_\Psi]$$

avec $\gamma_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, puis

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w_\varepsilon \gamma^{(2)}_\Psi] = \frac{2}{(N-1)(N-2)} \,\mathrm{Tr} \left[\sum_{1\leq i<j}^{N-1} w_\varepsilon(x_i - x_j)\gamma_\Psi \right]$$

et

$$\varepsilon \,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w^- \gamma^{(2)}_\Psi] = \frac{\varepsilon}{N-1} \,\mathrm{Tr} \left[\sum_{i=1}^{N-1} w^-(x_i - x_N)\gamma_\Psi \right].$$

Tout ceci implique

$$\begin{aligned} &\frac{N-1}{N} \langle \Psi, H^0_N \Psi \rangle \\ &\qquad = \left\langle \Psi, \left(\sum_{i=1}^{N-1} \Big(-\Delta_i - \varepsilon w^-(x_i - x_N) \Big) + \frac{1}{N-2} \sum_{1\leq i<j}^{N-1} w_\varepsilon(x_i - x_j) \right) \Psi \right\rangle . \quad (6.19) \end{aligned}$$

Dans l'équation précédente le Hamiltonien entre parenthèses depend de x_N via le potentiel à un corps $\varepsilon w^-(x_i - x_N)$ mais comme les autres termes sont invariants par translation, le bas du spectre est en fait indépendant de x_N. On a donc

$$\frac{N-1}{N} \langle \Psi, H^0_N \Psi \rangle \geq E^\varepsilon(N-1) \langle \Psi, \Psi \rangle \quad (6.20)$$

pour tout $\Psi \in L^2_s(\mathbb{R}^{dN})$, ce qui implique

$$\frac{E^0(N)}{N} \geq \frac{E^\varepsilon(N-1)}{N-1}.$$

Il est facile de voir que les suites $E^0(N)/N$ et $E^\varepsilon(N)/N$ sont croissantes et négatives, donc les limites a et a_ε existent et (6.20) implique (6.18) □

On va maintenant s'employer à prouver une borne inférieure sur $E^\varepsilon(N)$ pour ε suffisament petit. La raison pour laquelle il est plus aisé de travailler sur $E^\varepsilon(N)$ est que toutes les suites de matrices densité réduites correspondantes seront compactes dans $\mathfrak{S}^1$. En effet, la compacité ou son absence (en langage physique, l'existence ou l'absence de liaisons entre les particules) résulte d'une comparaison entre les effets attractifs et répulsifs des potentiels à un et deux corps. Ici les potentiels à un corps εw^- et à deux corps w_ε sont bien équilibrés puisque ils ont étés construits précisément en recherchant cet effet à partir du même potentiel à deux corps originel w. C'est cette observation qui nous permet de conclure maintenant la preuve du Théorème 6.2.

Preuve du Théorème 6.2. Comme d'habitude, seule la borne inférieure est non-triviale. Comme $e^0_{\rm H}(1) \leq 0$ on peut supposer $a < 0$ car sinon $a = e^0_{\rm H}(1) = 0$ et il n'y a rien à prouver. On va démontrer la borne inférieure

$$a_\varepsilon \geq e^\varepsilon_{\rm H}(1) := \inf_{\|u\|^2=1} \left\{ \langle u, (-\Delta - \varepsilon w_-)u\rangle + \frac{1}{2}\iint |u(x)|^2 w_\varepsilon(x-y)|u(y)|^2 dxdy \right\}, \quad (6.21)$$

et comme il est aisé de montrer que $e^\varepsilon_{\rm H}(1) \to e^0_{\rm H}(1)$ quand $\varepsilon \to$ on obtiendra (6.16) en combinant avec (6.18).

Soit une suite Ψ_N de fonctions d'onde telles que

$$\langle \Psi_N, H^\varepsilon_N \Psi_N\rangle = E^\varepsilon(N) + o(N).$$

et $\gamma^{(k)}_N$ les matrices de densité réduites correspondantes. Alors

$$a_\varepsilon = \lim_{N\to\infty} \frac{\langle \Psi_N, H^\varepsilon_N \Psi_N\rangle}{N} = \lim_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-)\gamma^{(1)}_N \right] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w_\varepsilon \gamma^{(2)}_N \right] \right).$$

Modulo l'extraction diagonale habituelle, on suppose que

$$\gamma^{(k)}_N \rightharpoonup_* \gamma^{(k)}$$

et nous allons montrer que la convergence est en réalité forte. On utilisera le théorème de de Finetti fort pour obtenir la théorie de Hartree dans un second temps.

En prenant une partition de l'unité $\chi_R^2 + \eta_R^2 = 1$ et en utilisant le Lemme 3.11 on a

$$\begin{aligned} a_\varepsilon \geq \liminf_{R\to\infty} \liminf_{N\to\infty} \Bigg\{ & \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-)\chi_R \gamma^{(1)}_N \chi_R \right] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w_\varepsilon \chi_R^{\otimes 2} \gamma^{(2)}_N \chi_R^{\otimes 2} \right] \\ & + \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[-\Delta \eta_R \gamma^{(1)}_N \eta_R \right] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w_\varepsilon \eta_R^{\otimes 2} \gamma^{(2)}_N \eta_R^{\otimes 2} \right] \Bigg\} \quad (6.22) \end{aligned}$$

et nous allons utiliser les états χ_R– et η_R–localisés G^χ_N et G^η_N définis à partir de Ψ_N par le Lemme 5.2 pour estimer séparément les deux termes du membre de droite de (6.22).

Le terme χ_R-localisé. En utilisant (5.10) et (5.11) on a

$$\begin{aligned} & \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-)\chi_R \gamma^{(1)}_N \chi_R \right] + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w_\varepsilon \chi_R^{\otimes 2} \gamma^{(2)}_N \chi_R^{\otimes 2} \right] \\ & \qquad = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^N \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k} \left[\left(\sum_{i=1}^k (-\Delta - \varepsilon w_-)_i + \frac{1}{N-1}\sum_{i<j}^k w_\varepsilon(x_i - x_j) \right) G^\chi_{N,k} \right] \quad (6.23) \end{aligned}$$

On applique l'inégalité

$$A + tB = (1-t)A + t(A+B) \geq (1-t)\inf\sigma(A) + t\inf\sigma(A+B) \quad (6.24)$$

avec

$$A = \sum_{\ell=1}^k (-\Delta - \varepsilon w_-)_\ell, \quad A + B = H_{\varepsilon,k}, \quad t = (k-1)/(N-1).$$

On a

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \inf\sigma(-\Delta - \varepsilon w_-) = \inf\sigma(-\Delta) = 0$$

et comme on suppose que $a < 0$, on a, pour ε assez petit

$$\inf \sigma(-\Delta - \varepsilon w_-) > a \geq a_\varepsilon \geq k^{-1} \inf \sigma(H_{\varepsilon,k}),$$

soit

$$\inf \sigma(A) \geq \inf \sigma(A + B).$$

On peut alors écrire

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[(-\Delta - \varepsilon w_-)\chi_R \gamma_N^{(1)} \chi_R] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[w_\varepsilon \chi_R^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} \chi_R^{\otimes 2}] \geq \sum_{k=1}^{N} \frac{k \,\mathrm{Tr}\, G_{N,k}^{\chi}}{N} \, \frac{E^\varepsilon(k)}{k},$$

mais comme

$$\sum_{k=0}^{N} \frac{k \,\mathrm{Tr}\, G_{N,k}^{\chi}}{N} = \mathrm{Tr}[\chi_R^2 \gamma_N^{(1)}] \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \mathrm{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}] \quad \text{et} \quad \lim_{k\to\infty} \frac{E^\varepsilon(k)}{k} = a_\varepsilon,$$

et que $k \mapsto \frac{E^\varepsilon(k)}{k}$ est croissante on conclut que

$$\liminf_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-)\chi_R \gamma_N^{(1)} \chi_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \chi_R^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} \chi_R^{\otimes 2} \right] \right) \geq a_\varepsilon \,\mathrm{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}] \quad (6.25)$$

par convergence monotone.

Le terme η_R-localisé. En utilisant les reśultats de la Section 5.2 comme ci-dessus on a

$$\begin{aligned} &\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T \eta_R \gamma_N^{(1)} \eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \eta_R^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} \eta_R^{\otimes 2} \right] \\ &\qquad = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k} \left[\left(\sum_{i=1}^{k} -\Delta_i + \frac{1}{N-1} \sum_{i<j}^{k} w_\varepsilon(x_i - x_j) \right) G_{N,k}^{\eta} \right]. \quad (6.26) \end{aligned}$$

Ici on utilise

$$-\Delta \geq 0, \quad w_\varepsilon = w + 2\varepsilon w^- \geq (1 - 2\varepsilon) w \text{ et } E^0(k) \leq ak < 0$$

pour obtenir

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{k} -\Delta_i + \frac{1}{N-1} \sum_{i<j}^{k} w_\varepsilon(x_i - x_j) &\geq \frac{(1-2\varepsilon)(k-1)}{N-1} H_k^0 \\ &\geq \frac{(1-2\varepsilon)(k-1)}{N-1} E^0(k) \geq E^0(k) - 2\varepsilon a k \end{aligned}$$

pour tout $k \geq 1$. En combinant avec (6.26) on obtient

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[-\Delta \eta_R \gamma_N^{(1)} \eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \eta_R^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} \eta_R^{\otimes 2} \right] \geq \sum_{k=1}^{N} \frac{k \,\mathrm{Tr}\, G_{N,k}^{\eta}}{N} \cdot \left(\frac{E^0(k)}{k} - 2\varepsilon a \right).$$

On déduit enfin

$$\liminf_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T \eta_R \gamma_N^{(1)} \eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \eta_R^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} \eta_R^{\otimes 2} \right] \right) \geq (1-2\varepsilon) a \big(1 - \mathrm{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}] \big) \quad (6.27)$$

en utilisant

$$\sum_{k=0}^{N} \frac{k}{N} \operatorname{Tr} G^{\eta}_{N,k} = \operatorname{Tr}[\eta_R^2 \gamma_N^{(1)}] \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 1 - \operatorname{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}] \quad \text{et} \quad \lim_{k\to\infty} \frac{E^0(k)}{k} = a$$

et le fait que $k \mapsto \frac{E^0(k)}{k}$ est une suite croissante.

Conclusion. En insérant (6.25) et (6.27) dans (6.22) on trouve

$$\begin{aligned} a_\varepsilon &\geq \liminf_{R\to\infty} \Big(a_\varepsilon \operatorname{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}] + (1-2\varepsilon) a \big(1 - \operatorname{Tr}[\chi_R^2 \gamma^{(1)}]\big) \Big) \\ &= a_\varepsilon \operatorname{Tr}[\gamma^{(1)}] + (1-2\varepsilon) a \big(1 - \operatorname{Tr}[\gamma^{(1)}]\big) \end{aligned}$$

Comme on a supposé que $a_\varepsilon \leq a < 0$, on obtient

$$\operatorname{Tr}[\gamma^{(1)}] = 1. \tag{6.28}$$

Il n'y a donc pas de perte de masse pour le problème auxiliaire défini au Lemme 6.3. Ceci suffit pour conclure à la convergence forte des matrices réduites $\gamma_N^{(k)}$. En effet, on peut appliquer le théorème de de Finetti faible à la suite des limites $\gamma^{(k)}$ pour obtenir une mesure μ sur la boule de $\mathfrak{H}$. Hors, (6.28) combiné avec (3.23) implique que la mesure doit en fait vivre sur la sphère unité. On a donc pour tout k

$$\operatorname{Tr}[\gamma^{(k)}] = 1,$$

ce qui implique que la convergence de $\gamma_N^{(k)}$ vers $\gamma^{(k)}$ est en réalité forte en norme de trace. On peut alors revenir à (6.22) pour obtenir

$$\begin{aligned} \liminf_{N\to\infty} \left(\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-) \gamma_N^{(1)} \right] + \frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \gamma_N^{(2)} \right] \right) \\ \geq \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[(-\Delta - \varepsilon w_-) \gamma^{(1)} \right] + \frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w_\varepsilon \gamma^{(2)} \right]. \end{aligned}$$

On applique ensuite le théorème de de Finetti fort aux limites des matrices de densité pour conclure que le membre de droite est nécessairement plus grand que $e_{\mathrm{H}}^{\varepsilon}(1)$ ce qui donne bien (6.21) et donc conclut la preuve. □

6.2. **Conclusion de la preuve dans le cas général.**

Nous avons maintenant presque tous les ingrédients nécessaires pour la preuve du Théorème 6.1. Il ne nous manque en fait qu'un tout petit peu d'information complémentaire sur le problème invariant par translation, comme nous l'expliquons maintenant.

Considérons pour $k \geq 2$ l'énergie

$$b_k(\lambda) := \frac{1}{k} \inf \sigma_{\mathfrak{H}^k} \left(\sum_{i=1}^{k} -\Delta_i + \frac{\lambda}{k-1} \sum_{i<j}^{k} w(x_i - x_j) \right) \tag{6.29}$$

c'est-à-dire une énergie pour k particules avec une interaction d'intensité $\frac{\lambda}{k-1}$. Les résultats de la section précédente montrent déjà que la limite $k \to \infty$ d'une telle énergie est donnée par $\lambda e_{\mathrm{H}}^0(\lambda)$ lorsque λ est un paramètre fixe. En utilisant la méthode de localisation dans l'espace de Fock, l'énergie des particules partant à l'infini lors de la minimisation d'une énergie pour $N \geq k$ particules sera naturellement décrite comme une superposition

d'énergies de systèmes à k particules avec une interaction d'intensité $1/(N-1)$ héritée du problème originel. Autrement dit, il s'agira d'évaluer une superposition des énergies $b_k(\lambda)$ avec

$$\lambda = \frac{k-1}{N-1},$$

un peu comme en (6.23) et (6.26). Comme ce λ dépend de k il sera utile de savoir que $b_k(\lambda)$ est équicontinue en λ:

Lemme 6.4 (**Equi-continuité de l'énergie en fonction de l'interaction**).
On prend les conventions

$$b_0(\lambda) = b_1(\lambda) = 0.$$

On a alors pour tout $\lambda \in [0,1]$

$$\lim_{k\to\infty} \lambda\, b_k(\lambda) = e^0_{\rm H}(\lambda). \tag{6.30}$$

De plus, pour tout $0 \leq \lambda \leq \lambda' \leq 1$

$$0 \leq b_k(\lambda) - b_k(\lambda') \leq C|\lambda - \lambda'| \tag{6.31}$$

où C ne dépend pas de k.

Preuve. On commence par confimer notre affirmation que (6.30) est une conséquence directe de l'analyse de la section précédente. Pour $\lambda = 0$ il n'y a rien à prouver. Pour $\lambda > 0$ on utilise le Théorème 6.2 pour obtenir

$$\begin{aligned}\lim_{k\to\infty} \lambda\, b_k(\lambda) &= \lambda \inf_{\|u\|^2=1} \left(\langle u, Ku\rangle + \frac{\lambda}{2} \iint w(x-y)|u(x)|^2|u(y)|^2 \right) \\ &= \inf_{\|u\|^2=\lambda} \left(\langle u, Ku\rangle + \frac{1}{2} \iint w(x-y)|u(x)|^2|u(y)|^2 \right) = e^0_{\rm H}(\lambda).\end{aligned}$$

Le fait que

$$b_k(\lambda) \geq b_k(\lambda') \text{ pour tout } 0 \leq \lambda < \lambda' \leq 1$$

est une conséquence de (6.24). Pour l'équicontinuité (6.31) on fixe un $0 < \alpha \leq 1$ et on remarque que, avec

$$\delta := (\lambda' - \lambda)(\alpha^{-1} - \lambda)^{-1},$$

on a

$$\begin{aligned}\frac{1}{k}\left(\sum_{i=1}^k K_i + \frac{\lambda'}{k-1} \sum_{i<j}^k w_{ij} \right) &= \frac{1-\delta}{k} \left(\sum_{i=1}^k K_i + \frac{\lambda}{k-1} \sum_{i<j}^k w_{ij} \right) \\ &\quad + \frac{\delta}{k\alpha} \left(\alpha \sum_{i=1}^k K_i + \frac{1}{k-1} \sum_{i<j}^k w_{ij} \right) \\ &\geq (1-\delta) b_k(\lambda) - \frac{C\delta}{\alpha}\end{aligned}$$

en utilisant le fait que le spectre de l'opérateur appraraissant à la deuxième ligne est borné inférieurement. On déduit donc

$$0 \leq b_k(\lambda) - b_k(\lambda') \leq \delta(b_k(\lambda) + C\alpha^{-1}) \leq C|\lambda' - \lambda|$$

puisque $b_k(\lambda)$ est uniformément borné et $|\delta| \leq C|\lambda - \lambda'|$. □

Nous pouvons maintenant conclure:

Preuve du Théorème 6.1. Soit Ψ_N une suite de fonctions d'onde à N corps telle que

$$\langle \Psi_N, H_N^V \Psi_N \rangle = E^V(N) + o(N)$$

avec $\gamma_N^{(k)}$ les matrices de densité réduites associées. Modulo une extraction diagonale on suppose que

$$\gamma_N^{(k)} \rightharpoonup \gamma^{(k)}$$

faiblement-$*$. Le Théorème 3.6 fournit alors une mesure de probabilité μ telle que

$$\gamma^{(k)} = \int_{u \in B\mathfrak{H}} d\mu(u) |u^{\otimes k}\rangle\langle u^{\otimes k}|. \tag{6.32}$$

Soit une partition de l'unité régulière $\chi_R^2 + \eta_R^2 = 1$ comme précédement et les états localisés G_N^χ et G_N^η construits à partir de $|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|$. En utilisant à nouveau le Lemme 3.11 on obtient

$$\begin{aligned}
\lim_{N\to\infty} \frac{E^V(N)}{N} &= \lim_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T\gamma_N^{(1)} \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\gamma_N^{(2)} \right] \right) \\
&\geq \liminf_{R\to\infty} \liminf_{N\to\infty} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\chi_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\chi_R^{\otimes 2} \right] \right. \\
&\qquad \left. + \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\eta_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\eta_R^{\otimes 2} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{6.33}$$

On utilise d'abord la compacité locale forte et (6.32) pour le terme χ_R-localisé:

$$\begin{aligned}
&\liminf_{N\to\infty} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T\chi_R\gamma_N^{(1)}\chi_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\chi_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\chi_R^{\otimes 2} \right] \right\} \\
&\qquad \geq \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[T\chi_R\gamma^{(1)}\chi_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\chi_R^{\otimes 2}\gamma^{(2)}\chi_R^{\otimes 2} \right] = \int_{B\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}^V[\chi_R u] d\mu(u).
\end{aligned} \tag{6.34}$$

Notre tâche principale est de contrôler le second terme du membre de droite de (6.33). Nous prétendons que

$$\liminf_{N\to\infty} \left(\mathrm{Tr} \left[T\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\eta_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\eta_R^{\otimes 2} \right] \right) \geq \int_{B\mathfrak{H}} e_{\mathrm{H}}^0 (1 - \|\chi_R u\|^2) d\mu(u). \tag{6.35}$$

En effet, en utilisant l'état η_R-localisé G_N^η on a

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}} \left[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R \right] + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[w\eta_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\eta_R^{\otimes 2} \right] &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k} \left[\left(\sum_{i=1}^k -\Delta_i + \frac{1}{N-1} \sum_{i<j}^k w_{ij} \right) G_{N,k}^\eta \right] \\
&\geq \sum_{k=1}^N \frac{1}{N} \mathrm{Tr}\, G_{N,k}^\eta \inf \sigma_{\mathfrak{H}^k} \left(\sum_{i=1}^k -\Delta_i + \frac{1}{N-1} \sum_{i<j}^k w_{ij} \right) \\
&\geq \sum_{k=0}^N \mathrm{Tr}\, G_{N,k}^\eta \frac{k}{N} b_k \left(\frac{k-1}{N-1} \right)
\end{aligned}$$

où b_k est la fonction définie en (6.29). D'un autre côté

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,k}^{\eta}\left(\frac{k}{N}b_k\left(\frac{k-1}{N-1}\right)-e_{\mathrm{H}}^{0}\left(\frac{k}{N}\right)\right)=0, \tag{6.36}$$

puisque en utilisant l'équicontinuité de $\{b_k\}_{k=1}^{\infty}$ et la convergence $\lim_{k\to\infty}\lambda b_k(\lambda)=e_{\mathrm{H}}^{0}(\lambda)$ fournies par le Lemme 6.4 on obtient

$$\lim_{N\to\infty}\sup_{k=1,2,\dots,N}\left|\frac{k}{N}b_k\left(\frac{k-1}{N-1}\right)-e_{\mathrm{H}}^{0}\left(\frac{k}{N}\right)\right|=0,$$

qu'il suffit de combiner avec

$$\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,k}^{\eta}=1$$

pour obtenir (6.36). A ce stade on a donc

$$\liminf_{N\to\infty}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[-\Delta\eta_R\gamma_N^{(1)}\eta_R\right]+\frac{1}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w\eta_R^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}\eta_R^{\otimes 2}\right]\geq\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,k}^{\eta}e_{\mathrm{H}}^{0}\left(\frac{k}{N}\right).$$

On utilise maintenant la relation (5.12) et le Corollaire 5.4 comme indiqué Section 5.3 pour obtenir

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,k}^{\eta}\,e_{\mathrm{H}}^{0}\left(\frac{k}{N}\right)&=\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,N-k}^{\chi}\,e_{\mathrm{H}}^{0}\left(\frac{k}{N}\right)\\&=\lim_{N\to\infty}\sum_{k=0}^{N}\operatorname{Tr} G_{N,k}^{\chi}\,e_{\mathrm{H}}^{0}\left(1-\frac{k}{N}\right)=\int_{B\mathfrak{H}}e_{\mathrm{H}}^{0}(1-\|\chi_R u\|^2)d\mu(u),\end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve de (6.35).

Il reste maintenant à insérer (6.34) et (6.35) dans (6.33) et à utiliser le lemme de Fatou, ce qui donne

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}\frac{E^V(N)}{N}&\geq\liminf_{R\to\infty}\left(\int_{B\mathfrak{H}}\left[\mathcal{E}_{\mathrm{H}}^{V}[\chi_R u]+e_{\mathrm{H}}^{0}(1-\|\chi_R u\|^2)\right]d\mu(u)\right)\\&\geq\int_{B\mathfrak{H}}\liminf_{R\to\infty}\left[\mathcal{E}_{\mathrm{H}}^{V}[\chi_R u]+e_{\mathrm{H}}^{0}(1-\|\chi_R u\|^2)\right]d\mu(u)\\&=\int_{B\mathfrak{H}}\left[\mathcal{E}_{\mathrm{H}}^{V}[u]+e_{\mathrm{H}}^{0}(1-\|u\|^2)\right]d\mu(u)\\&\geq\int_{B\mathfrak{H}}\left[e_{\mathrm{H}}^{V}(\|u\|^2)+e_{\mathrm{H}}^{0}(1-\|u\|^2)\right]d\mu(u)\geq e_{\mathrm{H}}(1),\end{aligned} \tag{6.37}$$

en utilisant la continuité de $\lambda\mapsto e_{\mathrm{H}}^{0}(\lambda)$ et l'inégalité de liaison large (6.9). Ceci conclut la preuve de (6.10), et les autres résultats du théorème suivent en analysant les cas d'égalité dans (6.37). □

7. **Dérivation de fonctionnelles de type Gross-Pitaevskii**

Nous allons maintenant nous tourner vers l'obtention de fonctionnelles de type Schrödinger non linéaire (NLS) avec non-linéarités locales:

$$\mathcal{E}_{\rm nls}[\psi] := \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\psi|^2 + V|\psi|^2 + \frac{a}{2}|\psi|^4.$$

On peut obtenir cette description en partant d'une fonctionnelle de Hartree comme (3.7) et en prenant un potentiel d'interaction convergeant (au sens des distributions) vers une masse de Dirac

$$w_L(x) = L^{-d} w\left(\frac{x}{L}\right) \rightharpoonup \left(\int_{\mathbb{R}^d} w\right) \delta_0 \text{ quand } L \to 0.$$

Puisqu'on a déjà obtenu (3.7) comme limite d'un problème à N corps, on peut être tenté de voir l'obtention de la description NLS comme un simple passage à la limite dans un problème à un corps. L'inconvénient de cette approche est l'absence totale de contrôle sur les relations entre les paramètres physiques N et L. On pourrait voir ceci comme un problème d'échange de limites: il n'est pas du tout clair que les limites $N \to \infty$ et $L \to 0$ commutent[27]. Une telle approche donne au mieux une information du type "il existe une suite $L_N \to 0$ telle que en prenant w de forme w_{L_N} dans (3.1), on obtient l'énergie NLS à la limite $N \to \infty$" mais on a aucun contrôle sur la vitesse à laquelle L_N est autorisé à tendre vers 0.

Plus généralement, la bonne question d'un point de vue physique est "Quelle relation doivent satisfaire N et L pour que l'on puisse obtenir l'énergie NLS en prenant *simultanément* $N \to \infty$ et $L \to 0$ dans le problème à N corps ?" Le processus permettant d'obtenir la fonctionnelle NLS est donc plus subtil que pour l'obtention de la fonctionnelle de Hartree, et nous allons dans un premier temps donner quelques explications sur ce point.

7.1. **Remarques préliminaires.**

Jusqu'à présent nous avons travaillé avec seulement deux paramètres physiques: le nombre de particules N et la force des interactions λ. Pour avoir un problème limite bien défini nous avons été amené à considérer la limite de champ moyen où $\lambda \propto N^{-1}$. Dans ce cas, la portée des interactions est fixe et chaque particule interagit avec toutes les autres, ce qui donne une force d'interaction typique par particule d'ordre $\lambda N \propto 1$, comparable avec son énergie propre (cinétique + potentielle). On a vu que cet équilibrage des forces agissant sur chaque particule, combiné à des résultats de strucutre "à la de Finetti" pour l'ensemble des états bosoniques, mène naturellement à la conclusion que les particules se comportent approximativement de manière indépendante les unes des autres et donc que des descriptions de type Hartree sont valables dans la limite $N \to \infty$.

Il existe d'autres façons de justifier de tels modèles: l'équilibrage des forces qui permet à un problème limite d'émerger peut résulter d'un mécanisme plus subtil. Par exemple, dans les gaz alcalins ultra-froids qui ont permis l'observation en laboratoire de condensats de Bose-Einstein, il a plus à voir avec la *dilution* du système qu'avec la faible force des interactions. Pour une description théorique de ce phénomène on peut introduire dans notre modèle une longueur caractéristique L pour la portée des interactions. En prenant

[27] La limite $L \to 0$ du problème à N corps est d'ailleurs très difficile à définir proprement.

la taille du système total comme référence[28], un système dilué se matérialise par la limite $L \to 0$. La force d'interaction typique agissant sur chaque particule sera d'ordre $\lambda N L^d$ (force des interactions $\times$ nombre de particules typique dans une boule de rayon L autour d'une particule) et c'est ce paramètre que l'on peut vouloir fixer pour obtenir un problème limite. Plusieurs régimes sont alors possibles en fonction du ratio entre λ et L.

On peut discuter ces différentes possiblités en partant du Hamiltonien à N corps[29]

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} -\Delta_j + V(x_j) + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} N^{d\beta} w(N^\beta (x_i - x_j)) \tag{7.1}$$

qui correspond à faire les choix

$$L = N^{-\beta}, \quad \lambda \propto N^{d\beta - 1},$$

le paramètre fixe $0 \leq \beta$ servant à ajuster le rapport entre L et λ. On considérera le potentiel d'interaction de référence w comme étant fixe, et on notera

$$w_N(x) := N^{d\beta} w(N^\beta x). \tag{7.2}$$

Pour $\beta > 0$, w_N converge vers une masse de Dirac au sens des distributions

$$w_N \to \left(\int_{\mathbb{R}^d} w \right) \delta_0, \tag{7.3}$$

matérialisant la courte portée des interactions/la dilution du sytème. En raisonnant formellement, on peut vouloir remplacer directement w_N par $\left(\int_{\mathbb{R}^d} w\right) \delta_0$ dans (7.1) auquel cas on se retrouve avec une limite de type champ moyen, avec une masse de Dirac comme potentiel d'interaction. Ceci est bien sûr purement formel (sauf en 1D où l'injection de Sobolev $H^1 \hookrightarrow C^0$ permet de définir proprement les interactions de contact). En admettant que ces manipulations aient un sens et que l'on puisse approximer le fondamental de (7.1) sous la forme

$$\Psi_N = \psi^{\otimes N} \tag{7.4}$$

on obtient une fonctionnelle de Hartree

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\psi] := \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi|^2 + V|\psi|^2 + \frac{1}{2}|\psi|^2 (w * |\psi|^2). \tag{7.5}$$

où le potentiel d'interaction est à remplacer par une masse de Dirac à l'origine, ce qui mène à la fonctionnelle de Gross-Pitaevskii

$$\mathcal{E}_{\mathrm{nls}}[\psi] := \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi|^2 + V|\psi|^2 + \frac{a}{2}|\psi|^4. \tag{7.6}$$

Au vu de (7.3), le choix logique semble d'imaginer que lorsque $\beta > 0$, on obtienne à partir de la minimisation du Hamiltonien (7.1) la fonctionnelle ci-dessus avec

$$a = \int_{\mathbb{R}^d} w. \tag{7.7}$$

[28] i.e. en fixant la densité de particules.

[29] Encore une fois, il est possible de rajouter Laplaciens fractionnaires et/ou champs magnétiques, cf Remarque 3.1, ce que nous négligerons pour simplifier.

En fait, on peut obtenir la gamme de résultats suivants (décrits dans le cas $d = 3$, le cas $d \leq 2$ menant à des subtilités et le cas $d \geq 4$ n'ayant pas grand intérêt physiquement parlant):

- Si $\beta = 0$ nous retrouvons le régime de champ moyen (MF, pour mean-field) étudié précédement. La portée du potentiel d'interaction est fixe et son intensité décroît comme N^{-1}. Le problème limite est alors (7.5), comme démontré précédement.
- Si $0 < \beta < 1$, le problème limite est bien comme on pouvait s'y attendre (7.6) avec le choix de paramètre (7.7). Nous parlerons de limite de Schrödinger non-linéaire (NLS). Ce cas n'a pas été considéé spécifiquement dans la litérature mais, au moins lorsque $w \geq 0$ et lorsque V est confinant, on peut adapter l'analyse du cas plus difficile $\beta = 1$.
- Si $\beta = 1$, la fonctionnelle limite est maintenant (7.6) avec

$$a = 4\pi \times \text{ longueur de diffusion de } w$$

(voir [107, Appendice C] pour une définition). Dans ce cas, le fondamental de (7.1) inclut une correction à l'ansatz (7.4), sous la forme de corrélations à courte portée. En fait, il faut s'attendre à avoir plus précisément

$$\Psi_N(x_1, \dots, x_N) \approx \prod_{j=1}^{N} \psi(x_j) \prod_{1 \leq i < j \leq N} f\left(N^\beta (x_i - x_j)\right) \tag{7.8}$$

où f est lié au problème à deux corps défini par w (solution de diffusion d'énergie minimale). Il se trouve que lorsque $\beta = 1$, la correction a un effet sur le premier ordre de l'énergie, celui de remplacer $\int_{\mathbb{R}^d} w$ par la longueur de diffusion correspondante comme remarqué pour la première fois dans [52]. On parle alors de limite de Gross-Pitaevskii (GP), qui a fait l'objet d'une longue et remarquable série de travaux dûs à Lieb, Seiringer et Yngvason (voir par exemple [116, 117, 109, 108, 110, 105, 107]).

Comme nous l'avons déjà mentionné, les problèmes d'évolution correspondants ont également étés abondament étudiés. Là aussi il convient de distinguer les limites de champ moyen (voir par exemple [9, 4, 69, 139, 132]) de Schrödinger non-linéaire [61, 131] et de Gross-Pitaevskii [62, 130].

Il y a une différence physique fondamentale entre les régimes MF et GP: Dans les deux cas le paramètre d'interaction effectif $\lambda N L^3$ est d'ordre 1 mais on passe (toujours en 3D) d'un cas avec des collisions nombreuses mais faibles $\lambda = N^{-1}$, $L = 1$ à un cas avec des collisions rares mais très fortes, $\lambda = N^2$, $L = N^{-1}$. Les différents cas NLS interpolent en quelque sorte entre ces deux extrêmes, le passage entre "collisions faibles mais fréquentes" et "collisions fortes mais rares" se faisant à $\lambda = 1, L = N^{-1/3}$, i.e. $\beta = 1/3$.

La difficulté pour obtenir (7.6) en passant à la limite $N \to \infty$ est qu'il y a en fait deux limites distinctes, $N \to \infty$ et $w_N \to a\delta_0$ à contrôler en même temps. Un simple argument de compacité/passage à la limite sera insuffisant dans ce cas et il faudra donc travailler avec des estimations quantitatives. Le but de ce chapitre est de montrer comment on peut procéder à partir du théorème de de Finetti quantitatif présenté au Chapitre 4. Puisque ce théorème n'est valable qu'en dimension finie, il nous faudra disposer d'une manière naturelle de projeter le problème sur des espaces de dimension finie. Nous nous placerons

donc dans le cadre des gaz de bosons piégés en supposant que, pour deux constantes $c, C > 0$

$$c|x|^s - C \leq V(x \tag{7.9}$$

Dans ce cas, le Hamiltonien à un corps $-\Delta + V$ a un spectre discret sur lequel on a bon contrôle via des inégalités à la Lieb-Thirring.

Les résultats que nous allons obtenir sont valables pour $0 < \beta < \beta_0$ où $\beta_0 = \beta_0(d, s)$ ne dépend que de la dimension de l'espace physique et du potentiel V. Nous fournirons des estimations explicites de β_0, mais la méthode que nous présentons, issue de [97], est pour l'instant limitée à des β relativement petits. En particulier on obtiendra toujours (7.7) comme paramètre d'interaction. L'avantage principal par rapport à la méthode de Lieb-Seiringer-Yngvason [116, 108, 110, 105] est que nous pouvons dans certains cas relaxer l'hypothèse $w \geq 0$ qui est toujours faite dans les travaux sus-mentionnés (voir aussi [107]). En particulier nous présenterons la première dérivation des fonctionnelles NLS attractives[30] en 1D et 2D.

7.2. **Enoncés et discussion.**

Puisque nous nous intéressons à une limite où le potentiel d'interaction w_N devient singulier de toutes façons, nous prendrons des hypothèses confortables sur w:

$$w \in L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \text{ et } w(x) = w(-x). \tag{7.10}$$

Sans perte de généralité, on posera

$$\sup_{\mathbb{R}^d} |w| = 1$$

pour simplifier certaines expressions. On supposera également que

$$x \mapsto (1 + |x|)w(x) \in L^1(\mathbb{R}^d) \tag{7.11}$$

ce qui facilite le remplacement de w_N par une masse de Dirac. Comme d'habitude nous utiliserons la même notation w_N pour le potentiel d'interaction (7.2) et l'opérateur de multiplication par $w_N(x - y)$ agissant sur $L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Pour $\beta = 0$ on a montré précédemment que

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = e_{\mathrm{H}}. \tag{7.12}$$

Nous traitons maintenant le cas $0 < \beta < \beta_0(d, s) < 1$ où on obtient l'énergie fondamentale de (7.6) à la limite:

$$e_{\mathrm{nls}} := \inf_{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}=1} \mathcal{E}_{\mathrm{nls}}[\psi] \tag{7.13}$$

avec a donné par (7.7). A cause de la non-linéarité locale, la théorie NLS est plus délicate que la théorie de Hartree et il nous faut quelques hypothèses de structure sur le potentiel d'interaction (voir [97] pour une discussion plus poussée):

[30] On utilise souvent le vocabulaire de l'optique non-linéaire pour distinguer les cas attractif et répulsif: répulsif = défocusant, attractif = focusant.

- Quand $d = 3$, il est bien connu qu'un fondamental pour (7.6) existe si et seulement si $a \geq 0$. Ceci est dû au fait que la non-linéarité cubique est sur-critique[31] dans ce cas. De plus, il est facile de voir que $N^{-1}E(N) \to -\infty$ si w est négatif à l'origine. L'hypothèse optimale se trouve être une hypothèse de stabilité classique pour le potentiel d'interaction:

$$\iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \rho(x) w(x-y) \rho(y) dx dy \geq 0, \text{ pour tout } \rho \in L^1(\mathbb{R}^d),\ \rho \geq 0. \tag{7.14}$$

  Cette hypothèse est vérifiée dès que $w = w_1 + w_2$ avec $w_1 \geq 0$ et $\hat{w_2} \geq 0$ avec $\hat{w_2}$ la transformée de Fourier de w_2. Elle implique clairement $\int_{\mathbb{R}^d} w \geq 0$, et on peut voir aisément par un changement d'échelle que si elle violée pour un certain $\rho \geq 0$ alors $E(N)/N \to -\infty$.
- Quand $d = 2$, la non-linéarité cubique est critique. Un minimiseur pour (7.6) existe si et seulement si $a > -a^*$ où

$$a^* = \|Q\|_{L^2}^2 \tag{7.15}$$

  avec $Q \in H^1(\mathbb{R}^2)$ l'unique [92] (modulo translations) solution de

$$-\Delta Q + Q - Q^3 = 0. \tag{7.16}$$

  Le paramètre d'interaction critique a^* est la meilleure constante possible dans l'inégalité d'interpolation

$$\int_{\mathbb{R}^2} |u|^4 \leq C \left(\int_{\mathbb{R}^2} |\nabla u|^2 \right) \left(\int_{\mathbb{R}^2} |u|^2 \right). \tag{7.17}$$

  Voir [76, 123] pour l'existence d'un fondamental et [168] pour l'inégalité (7.17). Il est alors clair qu'en 2D, il nous faudra supposer $\int w \geq -a^*$, mais ce n'est en fait pas suffisant: comme en 3D, si le potentiel d'interaction est suffisament négatif à l'origine, on peut voir que $N^{-1}E(N) \to -\infty$. L'hypothèse adéquate est cette fois

$$\|u\|_{L^2}^2 \|\nabla u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y)\, dx\, dy > 0 \tag{7.18}$$

  pour tout $u \in H^1(\mathbb{R}^2)$. En remplaçant u par $\lambda u(\lambda x)$ et en prenant la limite $\lambda \to 0$ on obtient

$$\|u\|_{L^2}^2 \|\nabla u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^2} w \right) \int_{\mathbb{R}^2} |u(x)|^4\, dx \geq 0, \qquad \forall u \in H^1(\mathbb{R}^2),$$

  ce qui implique que

$$\int_{\mathbb{R}^2} w(x)\, dx \geq -a^*.$$

  Un argument de changement d'échelle montre que si l'inégalité stricte dans (7.18) est inversée pour un certain u, alors $E(N)/N \to -\infty$. La cas ou il peut il y a voir égalité dans (7.18) est laissé de côté car il requiert une analyse plus poussée, cf l'analyse du cas correspondant au niveau de la fonctionnelle NLS dans [76].

[31] On pourra consulter par exemple [88] pour une classification des non-linéarités dans l'équation de Schrödinger non-linéaire.

- Quand $d = 1$, la non-linéarité cubique est sous-critique et il y a toujours un minimiseur pour la fonctionnelle (7.6). Dans ce cas nous n'aurons pas besoin d'hypothèse supplémentaire.

Nous pouvons maintenant énoncer le

Théorème 7.1 (Dérivation de la fonctionnelle NLS).
On se place dans l'un des cas $d = 1$, $d = 2$ avec (7.18), $d = 3$ avec (7.14) et on suppose

$$0 < \beta \leq \beta_0(d, s) := \frac{s}{2ds + sd^2 + 2d^2} < 1. \tag{7.19}$$

où s est l'exposant apparaissant dans (7.9). On a alors:

(1) *Convergence de l'énergie:*

$$\frac{E(N)}{N} \to e_{\rm nls}. \tag{7.20}$$

(2) *Convergence des états: Soit Ψ_N un fondamental de (7.1) et*

$$\gamma_N^{(n)} := \mathrm{Tr}_{n+1\to N}\left[|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\right]$$

ses matrices de densité réduites. Modulo une sous-suite, on a pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$\lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = \int_{u\in\mathcal{M}_{\rm nls}} d\mu(u)|u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| \tag{7.21}$$

fortement dans $\mathfrak{S}^1(L^2(\mathbb{R}^{dn}))$. Ici μ est une mesure de probabilité supportée sur

$$\mathcal{M}_{\rm nls} = \left\{u \in L^2(\mathbb{R}^d), \|u\|_{L^2} = 1, \mathcal{E}_{\rm nls}[u] = e_{\rm nls}\right\}. \tag{7.22}$$

En particulier, quand (7.6) a un minimiseur $u_{\rm nls}$ unique à une phase près, on a pour toute la suite

$$\lim_{N\to\infty} \gamma_N^{(n)} = |u_{\rm nls}^{\otimes n}\rangle\langle u_{\rm nls}^{\otimes n}|. \tag{7.23}$$

L'unicité de $u_{\rm nls}$ est assurée si $a \geq 0$ ou $|a|$ est petit. Si ces conditions ne sont pas satisfaites, on peut montrer l'absence d'unicité pour certains potentiels de piégeage ayant plusieurs minima [8, 76].

Remarque 7.2 (Sur la dérivation de la fonctionnelle NLS.).

(1) L'hypothèse $\beta < \beta_0(d, s)$ est dictée par la méthode de preuve mais n'est certainement pas optimale, on pourra voir dans cette direction les travaux [105, 108, 116, 117]. On peut relaxer un peu la condition sur β, au prix de calculs un peu plus lourds dont nous préférons faire l'économie dans ces notes, voir [97]. En 1D, on peut obtenir le résultat pour tout $\beta > 0$.
(2) Regardons un peu plus en détail les conditions sur $\beta_0(d, s)$. Pour le cas d'un potentiel de piégeage quadratique $V(x) = |x|^2$ par exemple, nous pouvons traiter $\beta < 1/24$ en 3D, $\beta < 1/12$ en 2D et $\beta < 1/4$ en 1D. La méthode de preuve s'adapte sans difficultés au cas de particules dans un domaine borné, ce qui correspond à prendre formellement $s = \infty$. On obtient alors $\beta_0(d, s) = 1/15$ en 3D, $1/8$ en 2D et $1/3$ en 1D. L'amélioration de ces seuils pour le cas de potentiels comportant une partie attractive reste un problème ouvert.

(3) Lorsque β s'éloigne du seuil critique $\beta_0(d,s)$, la méthode de preuve fournit des estimations quantitatives pour la convergence (7.20), voir ci-dessous. Voir [97, Remarque 4.2] pour une discussion des cas où un taux de convergence pour le minimiseur peut être déduit en se basant sur des outils de [26, 67] et des hypothèses sur le comportement de la fonctionnelle NLS. □

La preuve de ce résultat occupe le reste de ce chapitre. On procède en deux temps. Le gros du travail consiste en l'obtention d'une estimation quantitative entre l'énergie N corps par particules $N^{-1}E(N)$ et l'énergie de Hartree

$$e_{\rm H} := \inf_{\|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}=1} \mathcal{E}_{\rm H}[u] \tag{7.24}$$

donnée par la minimisation de la fonctionnelle

$$\mathcal{E}_{\rm H}[u] := \int_{\mathbb{R}^d} \left(|\nabla u|^2 + V|u|^2 \right) dx + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 w_N(x-y)|u(y)|^2 dxdy. \tag{7.25}$$

Ces objets dépendent de N quand $\beta > 0$, d'où la nécessité d'éviter les arguments de compacité et d'obtenir de vraies estimations. Une fois que le lien entre $N^{-1}E(N)$ et (7.24) est établi, il reste à estimer la différence $|e_{\rm nls} - e_{\rm H}|$, ce qui est un problème beaucoup plus simple. La plupart des hypothèses contraignantes que nous avons faites sur w ne servent que lors de cette deuxième étape. Les estimations sur la différence $|e_{\rm H} - N^{-1}E(N)|$ sont valides sans supposer (7.11) et (7.14) ou (7.18). Ils fournissent donc une information sur la divergence de $N^{-1}E(N)$ dans le cas où $e_{\rm H}$ ne converge pas vers $e_{\rm nls}$:

Théorème 7.3 (Dérivation quantitative de la théorie de Hartree).
On fait les hypothèses (7.9), (7.10). *Soit*

$$t := \frac{1+2d\beta}{2+d/2+d/s}. \tag{7.26}$$

Si on a

$$t > 2d\beta, \tag{7.27}$$

alors, pour tout $d \geq 1$ il existe une constante C_d telle que

$$e_{\rm H} \geq \frac{E(N)}{N} \geq e_{\rm H} - C_d N^{-t+2d\beta}. \tag{7.28}$$

Remarque 7.4 (Estimations explicites dans la limite de champ moyen).

(1) La condition (7.27) est satisfaite si $0 \leq \beta < \beta_0(d,s)$. Pour la preuve du Théorème 7.1 on ne s'intéresse qu'à des cas où $|e_{\rm H}|$ est borné indépendamment de N, et (7.28) donne alors une information non triviale seulement si (7.27) est satisfait.

(2) Le résultat est valable dans le cas de la limite de champ moyen où $\beta = 0$ et donc $e_{\rm H}$ ne dépend pas de N. On obtient alors des estimations explicites précisant le Théorème 3.5. Ces estimations présentent une nouveauté dans le cas où la fonctionnelle de Hartree a plusieurs minimiseurs, ou un seul minimiseur dégénéré. Dans le cas contraire[32] de meilleures estimations sont connues, avec une erreur d'ordre N^{-1} donnée par la théorie de Bogoliubov [99, 148, 75, 49]. Voir [126] pour

[32]L'exemple le plus simple assurant unicité et non dégénérescence est celui où $\hat{w} > 0$ avec $\hat{w}$ la transformée de Fourier de w.

des extensions de la théorie de Bogoliubov au cas de minimiseurs mutliples et/ou dégénérés.

□

La preuve du Théorème 7.3 occupera la Section 7.3. On complètera ensuite la preuve du Théorème 7.1 à la Section 7.4.

7.3. **Estimations quantitatives pour la théorie de Hartree.**

L'idée principale de la preuve est d'appliquer le Théorème 4.1 à un sous-espace propre de basse énergie de l'opérateur à un corps

$$T = -\Delta + V$$

agissant sur $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$. L'hypothèse (7.9) assure que la résolvante de cet opérateur est compacte et donc que son spectre est constitué d'une suite de valeurs propres tendant vers l'infini. On note P_- et P_+ les projecteurs spectraux correspondant aux énergies respectivement plus grandes et plus petites qu'une certaine troncature L:

$$P_- = \mathbb{1}_{(-\infty,L)}(T)\,,\ P_+ = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}} - P_- = P_-^{\perp}. \tag{7.29}$$

On notera

$$N_L := \dim(P_-\mathfrak{H}) = \text{ nombre de valeurs propres de } T \text{ inférieures à } L. \tag{7.30}$$

Puisque la précision du Théorème de de Finetti quantitatif dépend de la dimension de l'espace sur lequel on l'applique, il est clair qu'il nous faudra un contrôle convenable sur N_L. Les outils pour obtenir ce contrôle sont bien connus sous le nom d'inégalités de Lieb-Thirring, ou de Cwikel-Lieb-Rosenblum. Nous nous servirons du lemme suivant:

Lemme 7.5 (**Nombre d'états liés d'un opérateur de Schrödinger**).
Soit V satisfaisant (7.9)*. Pour tout $d \geq 1$, il existe une constante $C_d > 0$ telle que, pour L assez grand*

$$N_L \leq C_d L^{d/s+d/2}. \tag{7.31}$$

Preuve. Quand $d \geq 3$, ceci est une application de [106, Théorème 4.1]. Pour $d \leq 2$, le résultat suit aisément en appliquant [37, Théorème 2.1] ou [157, Théorème 15.8], voir [97]. Les lecteurs familiarisés peuvent se convaincre que le membre de droite de (7.31) est proportionnel au nombre de niveaux d'énergies attendu dans la limite semi-classique. On renvoie à [106, Chapitre 4] pour une discussion plus poussée de ce genre d'inégalités. □

Le raisonnement que nous allons implémenter est le suivant:

(1) Les vecteurs propres de T forment une base de $L^2(\mathbb{R}^d)$ sur laquelle les N bosons doivent se répartir. Les méthodes du Chapitre 5 fournissent la bonne façon d'analyser la répartition des particules entre $P_-\mathfrak{H}$ et $P_+\mathfrak{H}$.
(2) Si la troncature L est choisie assez grande, les particules vivant sur les niveaux d'énergie élevés ont une énergie par unité de masse bien plus grande que l'énergie de Hartree que l'on cherche à obtenir. Il ne peut donc il y avoir que peu de particules sur les niveaux d'énergie élevés.
(3) Les particules vivant sur $P_-\mathfrak{H}$ forment un état de $\mathcal{F}_s^{\leq N}(P_-\mathfrak{H})$ (espace de Fock bosonique tronqué). Puisque $P_-\mathfrak{H}$ est de dimension finie, on peut se servir du Théorème 4.1 pour décrire ces particules. Ceci donnera l'énergie de Hartree à une erreur près, qui dépend de L et du nombre attendu de particules P_--localisées.

Plus précisément, au vu de l'estimation (4.2), il faut s'attendre à ce que l'erreur soit du genre

$$\frac{(L+N^{d\beta})\times N_L}{N_-}, \tag{7.32}$$

i.e. dimension de l'espace localisé × norme d'opérateur du Hamiltonien restreint à cet espace localisé / nombre de particules localisées.

(4) Il s'agit ensuite d'optimiser la valeur de L en gardant l'heuristique suivante en tête: si L est grand, il y aura beaucoup de particules P_--localisées ce qui favorise le dénominateur de (7.32). En revanche, prendre L petit réduit le numérateur de (7.32). La valeur optimale obtenue en considérant ces deux effets donne les taux d'erreur du Théorème 7.3.

Preuve du Théorème 7.3. La borne supérieure dans (7.28) se prouve comme d'habitude en prenant un état test de forme $\psi^{\otimes N}$. Seule la borne inférieure est non triviale. On procède en plusieurs étapes.

Etape 1, troncature du Hamiltonien. Il s'agit d'abord de se convaincre qu'il est légitime de raisonner uniquement en termes de particules P_+ et P_--localisées comme nous l'avons fait ci-dessus. C'est l'objet du lemme suivant, qui estime le Hamiltonien à 2 corps

$$H_2 = T\otimes \mathbb{1} + \mathbb{1}\otimes T + w_N \tag{7.33}$$

en fonction de sa restriction aux systèmes P_--localisés $P_-\otimes P_-\, H_2\, P_-\otimes P_-$ et d'une borne grossière sur l'énergie des particules P_+-localisées.

Lemme 7.6 (Hamiltonien tronqué).
On suppose que $L \geq CN^{2d\beta}$ pour une constante C assez grande. On a alors

$$H_2 \geq P_-\otimes P_- H_2 P_-\otimes P_- + \frac{L}{2} P_+\otimes P_+ - \frac{36N^{2d\beta}}{L} \tag{7.34}$$

Preuve. On note

$$H_2^0 = H_1\otimes \mathbb{1} + \mathbb{1}\otimes H_1 \tag{7.35}$$

le Hamiltonien à deux corps sans interaction. On peut alors écrire

$$\begin{aligned} H_2^0 = (P_-+P_+)^{\otimes 2}\, H_2^0\, (P_-+P_+)^{\otimes 2} &= \sum_{i,j,k,\ell\in\{-,+\}} P_i\otimes P_j\, H_2^0\, P_k\otimes P_\ell \\ &= \sum_{i,j\in\{-,+\}} P_i\otimes P_j\, H_2^0\, P_i\otimes P_j. \end{aligned} \tag{7.36}$$

En effet,

$$P_i\otimes P_j\, H_2^0\, P_k\otimes P_\ell = 0$$

si $i\neq k$ or $j\neq \ell$, puisque T commute avec $P_\pm$ et que $P_-P_+=0$. On note ensuite que

$$P_+H_1P_+ \geq LP_+ \text{ et } P_-H_1P_- \geq -CP_-,$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} P_+\otimes P_+\, H_2^0\, P_+\otimes P_+ &\geq 2L\, P_+\otimes P_+ \\ P_+\otimes P_-\, H_2^0\, P_+\otimes P_- &\geq (L-C)P_+\otimes P_- \\ P_-\otimes P_+\, H_2^0\, P_-\otimes P_+ &\geq (L-C)P_+\otimes P_-. \end{aligned}$$

Ainsi,

$$H_2^0 \geq P_- \otimes P_-\, H_2^0\, P_- \otimes P_- + (L-C)(P_+ \otimes P_+ + P_- \otimes P_+ + P_+ \otimes P_-). \tag{7.37}$$

On se tourne vers les interactions:

$$w_N = (P_- + P_+)^{\otimes 2}\, w_N\, (P_- + P_+)^{\otimes 2} = \sum_{i,j,k,\ell \in \{-,+\}} P_i \otimes P_j\, w_N\, P_k \otimes P_\ell, \tag{7.38}$$

et il s'agit de borner la différence

$$w_N - P_- \otimes P_-\, w_N\, P_- \otimes P_-$$

en contrôlant les termes non diagonaux $(i,j) \neq (k,\ell)$ de (7.38) en fonction des termes diagonaux. A cette fin, on écrit

$$w_N = (w_N)^+ - (w_N)^- \text{ avec } (w_N)^\pm \geq 0$$

et on va utiliser le fait bien connu que les éléments diagonaux d'un opérateur auto-adjoint positif contrôlent les éléments hors-diagonaux[33].

Comme $w_N^\pm$ vus comme opérateurs de multiplication sur $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ sont positifs, on a pour tout $b > 0$ et tout $(i,j) \neq (k,\ell)$

$$\left(b^{1/2} P_i \otimes P_j \pm b^{-1/2} P_k \otimes P_\ell\right)\, w_N^\pm\, \left(b^{1/2} P_i \otimes P_j \pm b^{-1/2} P_k \otimes P_\ell\right) \geq 0.$$

En combinant ces inégalités de manière appropriée on obtient

$$P_i \otimes P_j\, w_N\, P_k \otimes P_\ell + P_k \otimes P_\ell\, w_N\, P_i \otimes P_j \geq -b P_i \otimes P_j |w_N| P_i \otimes P_j - b^{-1} P_k \otimes P_\ell |w_N| P_k \otimes P_\ell$$

pour tout $b > 0$. On rappelle alors qu'en tant qu'opérateur

$$|w_N| \leq \|w_N\|_{L^\infty} \leq N^{d\beta}$$

et on choisit $b = 12 N^{d\beta}/L$, ce qui donne

$$P_i \otimes P_j\, w_N\, P_k \otimes P_\ell + P_k \otimes P_\ell\, w_N\, P_i \otimes P_j \geq -\frac{12 N^{2\beta}}{L} P_i \otimes P_j - \frac{L}{12} P_k \otimes P_\ell.$$

On applique cette borne à tous les termes (i,j,k,ℓ) de (7.38) où au moins un indice diffère de $-$ pour obtenir

$$\begin{aligned} w_N \geq P_- \otimes P_-\, w_N\, P_- \otimes P_- - \frac{36 N^{2\beta}}{L} P_- \otimes P_- \\ - \left(\frac{L}{3} + \frac{48 N^{2d\beta}}{L}\right) (P_- \otimes P_+ + P_+ \otimes P_- + P_+ \otimes P_+). \end{aligned} \tag{7.39}$$

En combinant (7.37) et (7.39) on obtient pour tout $L \geq 1$ la borne inférieure

$$\begin{aligned} H_2 \geq P_- \otimes P_-\, H_2\, P_- \otimes P_- - \frac{36 N^{2d\beta}}{L} P_- \otimes P_- \\ + \left(\frac{2L}{3} - \frac{48 N^{2d\beta}}{L} - C\right) (P_- \otimes P_+ + P_+ \otimes P_- + P_+ \otimes P_+) \end{aligned}$$

[33] Cf pour une matrice hermitienne positive $(m_{i,j})_{1 \leq i,j \leq n}$ l'inégalité $2|m_{i,j}| \leq m_{i,i} + m_{j,j}$.

Puisqu'on suppose $L \geq CN^{2d\beta}$ pour une grande constante C, on peut utiliser $P_- \otimes P_- \leq \mathbb{1}$ et $P_- \otimes P_+$, $P_+ \otimes P_- \geq 0$ pour déduire

$$H_2 \geq P_- \otimes P_- \, H_2 \, P_- \otimes P_- - \frac{36N^{2d\beta}}{L} + \frac{L}{2} P_+ \otimes P_+,$$

ce qui conclut la preuve. □

Etape 2, estimation de l'énergie localisée. Soit Ψ_N un minimiseur pour l'énergie à N corps, $\Gamma_N = |\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|$ et

$$\gamma_N^{(n)} = \mathrm{Tr}_{n+1\to N}[\Gamma_N]$$

les matrices réduites correspondantes. Nous pouvons maintenant raisonner uniquement en termes des états P_- et P_+-localisés définis comme au Lemme 5.2 par les relations

$$\left(G_N^{\pm}\right)^{(n)} = P_{\pm}^{\otimes n} \gamma_N^{(n)} P_{\pm}^{\otimes n}. \tag{7.40}$$

On rappelle que $G_N^{\pm}$ sont des états sur l'espace de Fock tronqué, i.e.

$$\sum_{k=0}^{N} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}[G_{N,k}^{\pm}] = 1. \tag{7.41}$$

Nous comparons maintenant e_{H} et l'énergie localisée de Γ_N définie par le Hamiltonien tronqué du Lemme 7.6:

Lemme 7.7 (Borne inférieure pour l'énergie localisée).
Si $L \geq CN^{2d\beta}$ pour une constante C assez grande, on a

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)}\right] + \frac{L}{4}\,\mathrm{Tr}\left[P_+ \otimes P_+ \gamma_N^{(2)}\right] \geq e_{\mathrm{H}} - C\frac{LN_L}{N} - C\frac{L}{N^2}. \tag{7.42}$$

La preuve de ce lemme consiste en une application combinée du Théorème 4.1 et des méthodes du Chapitre 5. On va définir une mesure de de Finetti approchée en partant de G_N^-. L'idée est proche de celle que nous avons utilisé pour la preuve du théorème de de Finetti faible à la Section 5.3:

$$d\mu_N(u) = \sum_{k=2}^{N} \binom{N}{2}^{-1} \binom{k}{2} \dim(P_-\mathfrak{H})_s^k \left\langle u^{\otimes k}, G_{N,k}^- u^{\otimes k}\right\rangle du \tag{7.43}$$

où du est la mesure uniforme sur la sphère $SP_-\mathfrak{H}$. Le choix des poids dans la somme ci-dessus vient du fait que l'on cherche à approximer la matrice de densité à deux corps localisée $P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)} P_- \otimes P_-$, ce qui est l'objet du

Lemme 7.8 (De Finetti quantitatif pour un état localisé.).
Pour tout $L > 0$, on a

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left| P_-^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_N(u)\right| \leq \frac{8N_L}{N}.$$

Preuve. A normalisation près, $G_{N,k}^-$ est un état sur $(P_-\mathfrak{H})_s^{\otimes k}$. En appliquant le Théorème 4.1 avec la construction explicite (4.6) on a donc

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left|\mathrm{Tr}_{3\to k}\left[G_{N,k}^-\right] - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_{N,k}(u)\right| \leq 8\frac{N_L}{k}\,\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right]$$

avec

$$d\mu_{N,k}(u) = \dim(P_-\mathfrak{H})_s^k \Big\langle u^{\otimes k}, G_{N,k}^- u^{\otimes k} \Big\rangle du.$$

Au vu de (7.40) et (7.43) on déduit

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left| P_-^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_N(u) \right| \leq \sum_{k=2}^N \binom{N}{2}^{-1} \binom{k}{2} \frac{8N_L}{k} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k} \left[G_{N,k}^- \right].$$

Il reste alors à utiliser la normalisation (7.41) et

$$\binom{N}{2}^{-1} \binom{k}{2} = \frac{k(k-1)}{N(N-1)} \leq \frac{k}{N}$$

pour conclure la preuve. □

On peut maintenant passer à la

Preuve du Lemme 7.7. On commence par le terme P_--localisé. Par cyclicité de la trace on a

$$\mathrm{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)} \right] = \mathrm{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \big(P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)} P_- \otimes P_- \big) \right].$$

On applique alors le Lemme 7.8, ce qui donne

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left| P_-^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)} P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_N(u) \right| \leq \frac{8N_L}{N}.$$

D'autre part on a bien sûr

$$\| P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \| \leq 2L + \|w_N\|_{L^\infty} \leq 3L \tag{7.44}$$

en norme d'opérateur, et donc

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathrm{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)} \right] &\geq \frac{1}{2} \int_{SP_-\mathfrak{H}} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \left[H_2 |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| \right] d\mu_N - \frac{CLN_L}{N} \\ &= \int_{SP_-\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] d\mu_N - \frac{CLN_L}{N}. \end{aligned} \tag{7.45}$$

Par le principe variationnel $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] \geq e_{\mathrm{H}}$, on déduit

$$\frac{1}{2} \mathrm{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)} \right] \geq e_{\mathrm{H}} \sum_{k=2}^N \binom{N}{2}^{-1} \binom{k}{2} \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k} \left(G_{N,k}^- \right) - \frac{CLN_L}{N} \tag{7.46}$$

où le calcul de $\int d\mu_N$ est immédiat par la formule de Schur (4.5).

Pour les termes P_+-localisés on utilise (7.40), (5.10) et (5.12) pour obtenir

$$\begin{aligned} \frac{L}{4} \mathrm{Tr}[P_+ \otimes P_+ \gamma_N^{(2)} P_+ \otimes P_+] &= \frac{L}{4} \sum_{k=2}^N \binom{N}{2}^{-1} \binom{k}{2} \mathrm{Tr}\left[G_{N,k}^+ \right] \\ &= \frac{L}{4} \sum_{k=0}^{N-2} \binom{N}{2}^{-1} \binom{N-k}{2} \mathrm{Tr}\left[G_{N,k}^- \right]. \end{aligned} \tag{7.47}$$

En rassemblant (7.46), (7.47) et en rappellant que

$$\binom{N}{2}^{-1}\binom{k}{2} = \frac{k^2}{N^2} + O(N^{-1}), \quad \binom{N}{2}^{-1}\binom{N-k}{2} = \frac{(N-k)^2}{N^2} + O(N^{-1}),$$

on trouve

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)}\right] + \frac{L}{4}\operatorname{Tr}[P_+ \otimes P_+ \gamma_N^{(2)}] \\ &\geq \sum_{k=0}^{N} \operatorname{Tr}\left[G_{N,k}^-\right]\left(\frac{k^2}{N^2}e_{\mathrm{H}} + \frac{(N-k)^2}{N^2}\frac{L}{4}\right) - \frac{C(|e_{\mathrm{H}}|+L)}{N^2} - \frac{CLN_L}{N}. \end{aligned} \tag{7.48}$$

Le premier terme d'erreur vient du fait que les sommes dans (7.46) et (7.47) ne vont pas exactement de 0 à N, et nous avons utilisé la normalisation des état localisés (7.41) pour contrôler le terme manquant.

Il est facile de voir que pour tout p, q, $0 \leq \lambda \leq 1$

$$p\lambda^2 + q(1-\lambda)^2 \geq p - \frac{p^2}{q}.$$

On prend alors $p = e_{\mathrm{H}}$, $q = L/4$, $\lambda = k/N$ et on utilise (7.41) à nouveau pour déduire

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}\left[P_- \otimes P_- H_2 P_- \otimes P_- \gamma_N^{(2)}\right] + \frac{L}{2}\operatorname{Tr}(P_+ \otimes P_+ \gamma_N^{(2)}) \\ \geq e_{\mathrm{H}} - \frac{e_{\mathrm{H}}^2}{L} - \frac{C(|e_{\mathrm{H}}|+L)}{N^2} - \frac{CLN_L}{N}. \end{aligned}$$

de (7.48). Il reste à appliquer l'estimation simple

$$|e_{\mathrm{H}}| \leq C + \|w_N\|_{L^\infty} \leq C + N^{d\beta} \leq C + L \tag{7.49}$$

pour obtenir la borne inférieure désirée. □

Etape 3, optimisation finale.. Il ne nous reste qu'à optimiser la valeur de L. En effet, on rappelle que par définition

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{1}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}[H_2 \gamma_N^{(2)}]$$

avec le Hamiltonien à deux corps (7.33). En combinant les Lemmes 7.6 et 7.7 on a la borne inférieure

$$\frac{E(N)}{N} \geq e_{\mathrm{H}} - \frac{CN^{2d\beta}}{L} - C\frac{LN_L}{N} - C\frac{L}{N^2}$$

pour tout $L \geq CN^{2d\beta}$ avec C assez grand. En utilisant le Lemme 7.5, ceci se réduit à

$$\frac{E(N)}{N} \geq e_{\mathrm{H}} - \frac{CN^{2d\beta}}{L} - C_d\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N}.$$

En optimisant par rapport à L on obtient

$$L = N^t \tag{7.50}$$

avec

$$t = 2s\frac{1+2d\beta}{4s+ds+2d}$$

et la condition $t > 2d\beta$ dans (7.27) assure que $L \gg N^{2d\beta}$ pour N grand. On conclut donc

$$e_{\rm H} \geq \frac{E(N)}{N} \geq e_{\rm H} - C_d N^{-t+2d\beta},$$

ce qui est le résultat désiré. □

Remarque 7.9 (Note pour plus tard.).
En suivant les étapes de la preuve plus précisément on obtient des informations sur le comportement asymptotique des minimiseurs. Plus spécifiquement, revenant à (7.45), utilisant le Lemme 7.6 et ignorant les termes P_+ localisés qui sont positifs, on a

$$e_{\rm H} \geq \frac{E(N)}{N} \geq \frac{1}{2}\,{\rm Tr}[P_-^{\otimes 2} H_2 P_-^{\otimes 2} \gamma_N^{(2)}] + o(1) \geq \int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\rm H}[u] d\mu_N(u) + o(1)$$

et donc

$$o(1) \geq \int_{S\mathfrak{H}} \left(\mathcal{E}_{\rm H}[u] - e_{\rm H}\right) d\mu_N(u) \tag{7.51}$$

quand $N \to \infty$. Nous ne spécifions pas ici (cf le point (3) de la Remarque 7.2) l'ordre de grandeur exact du $o(1)$ obtenu par l'optimisation finale de l'étape 3 ci-dessus. L'estimation (7.51) dit moralement que μ_N doit être concentrée sur les minimiseurs de $\mathcal{E}_{\rm H}$, ce dont nous nous servirons pour prouver le Théorème 7.1. □

7.4. **De Hartree à NLS.**

Il nous reste à déduire le Théorème 7.1 comme corollaire de l'analyse ci-dessus. On commence par le lemme suivant

Lemme 7.10 (**Stabilité des fonctionnelles à un corps**).
On considère les fonctionnelles (7.25) *et* (7.6). *Sous les hypothèses du Théorème 7.1, il existe un minimiseur pour* $\mathcal{E}_{\rm nls}$. *De plus, pour toute fonction normalisée* $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ *on a*

$$|||u|||_{H^1}^2 \leq C(\mathcal{E}_{\rm H}[u] + C) \tag{7.52}$$

et

$$|\mathcal{E}_{\rm H}[u] - \mathcal{E}_{\rm nls}[u]| \leq C N^{-\beta} \left(1 + \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2\right)^2. \tag{7.53}$$

Par conséquent

$$|e_{\rm H} - e_{\rm nls}| \leq C N^{-\beta}. \tag{7.54}$$

Preuve. Les hypothèses de stabilité que nous avons faites garantissent que les suites minimisantes pour la minimisation de $\mathcal{E}_{\rm nls}$ sont bornées dans H^1. L'hypothèse (7.3) permet d'estimer aisément la différence entre les fonctionnelles de Hartree et NLS pour des fonctions bornées dans H^1. Les détails sont omis, on peut les trouver dans [97]. □

Nous somme maintenant armés pour compléter la dérivation de la fonctionnelle NLS.

Preuve du Théorème 7.1. Combiner (7.54) avec (7.28) conclut la preuve de (7.20). Il reste donc à prouver la convergence des états, deuxième point du Théorème. On procède en quatre étapes:
Etape 1, compacité forte des matrices densité. On extrait une sous-suite diagonale le long de laquelle

$$\gamma_N^{(n)} \rightharpoonup_* \gamma^{(n)} \tag{7.55}$$

s quand $N \to \infty$, pour tout $n \in \mathbb{N}$. On a par ailleurs

$$\mathrm{Tr}\left[H_1 \gamma_N^{(1)}\right] = \mathrm{Tr}\left[\left(-\Delta + V\right)\gamma_N^{(1)}\right] \leq C, \tag{7.56}$$

indépendamment de N. Pour le voir, on choisit un $\alpha > 0$ et on définit

$$H_{N,\alpha} = \sum_{j=1}^{N} \left(-\Delta_j + V(x_j)\right) + \frac{1+\alpha}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq N} N^{d\beta} w(N^\beta(x_i - x_j))$$

auquel on applique le Théorème 7.3. On trouve en particulier $H_{N,\alpha} \geq -CN$ et on déduit

$$e_{\mathrm{nls}} + o(1) \geq \frac{\langle \Psi_N, H_N \Psi_N\rangle}{N} \geq -C(1+\alpha)^{-1} + \frac{\alpha}{1+\alpha}\,\mathrm{Tr}\left[H_1 \gamma_N^{(1)}\right],$$

ce qui donne (7.56). Comme $H_1 = -\Delta + V$ est à résolvante compacte, (7.55) et (7.56) impliquent que, à une sous-suite près, $\gamma_N^{(1)}$ converge fortement en norme de trace. Comme noté précédement, le Théorème 3.4 implique que $\gamma_N^{(n)}$ aussi converge fortement pour $n \geq 1$.

Etape 2, définition de la mesure limite. On allégera les notations en notant r_N la meilleure borne sur $|E(N)/N - e_{\mathrm{nls}}|$ obtenue précédemment. Soit $d\mu_N$ définie comme au Lemme 7.8, satisfaisant

$$\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) = \mathrm{Tr}\left[P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2}\right]$$

On a

$$\mathrm{Tr}\left|P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_N(u)\right| \leq \frac{8N_L}{N} \leq C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} \to 0.$$

On peut d'autre part déduire des estimations d'énergie de la Section 7.3 un contrôle sur le nombre de particules excitées:

$$1 - \mu_N(SP_-\mathfrak{H}) = \mathrm{Tr}\left[(1-P_-^{\otimes 2})\gamma_N^{(2)}\right] \leq \frac{r_N}{L}. \tag{7.57}$$

Par l'inégalité triangulaire et l'inégalité de Cauchy-Schwarz on déduit

$$\mathrm{Tr}\left|\gamma_N^{(2)} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu_N(u)\right| \leq C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} + C\sqrt{\frac{r_N}{L}}. \tag{7.58}$$

On note maintenant P_K le projecteur spectral de H_1 sur les énergies sous une troncature K, défini comme en (7.29). Comme $\gamma_N^{(2)} \to \gamma^{(2)}$ et $P_K \to \mathbb{1}$

$$\lim_{K\to\infty}\lim_{N\to\infty} \mu_N(SP_K\mathfrak{H}) = 1.$$

Cette condition permet d'utiliser le Théorème de Prokhorov's et [158, Lemme 1] pour assurer que, après éventuellement extraction d'une sous-suite, μ_N converge vers une mesure μ sur la boule $B\mathfrak{H}$. En passant à la limite, on trouve

$$\gamma^{(2)} = \int_{B\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu(u)$$

et il s'ensuit que μ est à support sur la sphère $S\mathfrak{H}$ puisque $\mathrm{Tr}[\gamma^{(2)}] = 1$ par convergence forte de la sous-suite.

Etape 3, la mesure limite ne charge que les minimiseurs NLS. En utilisant (7.51) et

$$\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) = 1 + O\left(\frac{r_N}{L}\right),$$

on déduit que

$$\int_{SP_-\mathfrak{H}} \big(\mathcal{E}_{\rm H}[u] - e_{\rm H}\big) d\mu_N(u) \leq o(1)$$

dans la limite $N \to \infty$. Par les estimations du Lemme 7.10, il s'ensuit que, pour une constante B assez grande (indépendamment de N),

$$\frac{B^2}{C} \int_{\|\nabla u\|_{L^2} \geq B} d\mu_N(u) \leq \int_{\|\nabla u\|_{L^2} \geq B} \big(\mathcal{E}_{\rm H}[u] - e_{\rm H}\big) d\mu_N(u) \leq o(1),$$

et

$$\int_{\|\nabla u\|_{L^2} \leq B} \big(\mathcal{E}_{\rm nls}[u] - e_{\rm nls}\big) d\mu_N \leq C(1+B^4)N^{-\beta} + \int_{\|\nabla u\|_{L^2} \leq B} \big(\mathcal{E}_{\rm H}[u] - e_{\rm H}\big) d\mu_N(u) \leq o(1).$$

En passant à la limite $N \to \infty$, on voit maintenant que μ a son support dans $\mathcal{M}_{\rm nls}$.

A ce stade, en utilisant (7.58) et la convergence de μ_N on a, fortement en norme de trace,

$$\gamma_N^{(2)} \to \int_{\mathcal{M}_{\rm nls}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}| d\mu(u),$$

où μ est une probabilité à support dans $\mathcal{M}_{\rm nls}$. En prenant une trace partielle on obtient

$$\gamma_N^{(1)} \to \int_{\mathcal{M}_{\rm nls}} |u\rangle\langle u| d\mu(u)$$

et il ne reste donc plus qu'à obtenir la convergence des matrices densité réduites d'ordre $n > 2$.

Etape 4, matrices densité d'ordre élevé. On veut obtenir

$$\gamma_N^{(n)} \to \int_{\mathcal{M}_{\rm nls}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu(u),$$

en norme de trace quand $N \to \infty$. Vue la définition de μ, il suffit de montrer

$$\mathrm{Tr}\left|\gamma_N^{(n)} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu_N(u)\right| \to 0 \tag{7.59}$$

où μ_N est la mesure définie en appliquant le Lemme 7.8 à $\gamma_N^{(2)}$. Pour ce faire on commence par approximer $\gamma_N^{(n)}$ en utilisant une nouvelle mesure, a priori différente de $\mu_N = \mu_N^2$

$$d\mu_N^n(u) = \sum_{k=n}^N \binom{N}{n}^{-1} \binom{k}{n} \dim(P_-\mathfrak{H})_s^k \Big\langle u^{\otimes k}, G_{N,k}^- u^{\otimes k}\Big\rangle du. \tag{7.60}$$

En procédant comme à la preuve du Lemme 7.8 on obtient

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left|P_-^{\otimes n}\gamma_N^{(n)}P_-^{\otimes n} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu_N^n(u)\right| \leq C\frac{nN_L}{N} \tag{7.61}$$

Une estimation similaire à (7.57) montre ensuite que

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^n}\left|\gamma_N^{(n)} - \int_{SP_\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu_N^n(u)\right| \to 0.$$

En utilisant à nouveau la borne

$$\binom{N}{n}^{-1}\binom{k}{n} = \left(\frac{k}{N}\right)^n + O(N^{-1})$$

ainsi que l'inégalité triangulaire et la formule de Schur (4.5) on déduit de (7.61) que

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left|\gamma_N^{(n)} - \int_{SP_\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu_N(u)\right| &\leq \sum_{k=0}^{N}\left(\left(\frac{k}{N}\right)^2 - \left(\frac{k}{N}\right)^n\right)\mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] \\ &\quad + \sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{k}{N}\right)^n \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] \\ &\quad + \sum_{k=0}^{2}\left(\frac{k}{N}\right)^2 \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] + o(1). \qquad (7.62)\end{aligned}$$

Finalement, en combinant les différentes bornes obtenues on a

$$\sum_{k=2}^{N}\left(\frac{k}{N}\right)^2 \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] \to 1$$

mais, par (7.41) il suit que

$$\sum_{k=0}^{N}\left(\frac{k}{N}\right)^2 \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] \to 1.$$

On peut donc appliquer l'inégalité de Jensen pour obtenir

$$1 \geq \sum_{k=0}^{N}\left(\frac{k}{N}\right)^n \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right] \geq \left(\sum_{k=0}^{N}\left(\frac{k}{N}\right)^2 \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^k}\left[G_{N,k}^-\right]\right)^{n/2} \to 1.$$

Il ne reste qu'à insérer ceci et (7.41) dans (7.62) pour conclure la preuve de (7.59) et donc celle du théorème. □

Appendice A. **Usage Quantique du Théorème Classique**

Cet appendice est consacré à une preuve alternative d'une version plus faible du Théorème 3.5. La méthode, introduite dans [86] est de portée moins générale que celles décrites précédemment, ce qui est inévitable puisqu'elle consiste en l'application du théorème de Hewitt-Savage (de Finetti classique) à un problème quantique. Nous suivrons ici une note non publiée de à Mathieu Lewin et Nicolas Rougerie [100].

Dans certains cas (absence de champ magnétique essentiellement), la fonction d'onde Ψ_N minimisant une énergie à N corps peut-être choisie strictement positive. Le fondamental du problème quantique peut alors être entièrement analysé en termes de la densite à N corps $\rho_{\Psi_N} = |\Psi_N|^2$ qui est un objet purement classique (mesure de probabilité symétrique) dont la limite peut-être décrite à l'aide du Théorème 2.1. Cette approche ne fonctionne

toutefois que sous certaines hypothèses sur le Hamiltonien à un corps du problème, beaucoup plus restrictives que celles évoquées à la Remarque 3.1.

A.1. **Formulation classique du problème quantique.**

On considère ici un Hamiltonien quantique à N corps agissant sur $L^2(\mathbb{R}^{dN})$

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} (T_j + V(x_j)) + \frac{1}{N-1} \sum_{1\leq i<j\leq N} w(x_i - x_j) \tag{A.1}$$

où les potentiels de piégeage V et d'interaction w sont choisis comme à la Section 3.1. En particulier on suppose que V est confinant. L'opérateur T décrit l'énergie cinétique des particules et nous ferons l' hypothèse que T est de la forme suivante:

Définition A.1 (**Energie cinétique à noyau positif**)**.**
On dit que T est à noyau positif si il existe $T(x,y) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^+$ tel que

$$\langle \psi, T\psi \rangle = \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} T(x,y) \left|\psi(x) - \psi(y)\right|^2 dxdy \tag{A.2}$$

pour toute fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. □

Il est bien connu que les énergies cinétiques non-relativistes et pseudo-relativistes sont de cette forme. On a en effet

$$\begin{aligned} \langle \psi, -\Delta\psi \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\psi|^2 = C_d \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \frac{|\psi(x)-\psi(y)|^2}{|x-y|^d} dxdy \\ \langle \psi, |\nabla|\psi \rangle &= C'_d \iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \frac{|\psi(x)-\psi(y)|^2}{|x-y|^{d+1}} dxdy \end{aligned} \tag{A.3}$$

pour des constantes C_d et C'_d bien choisies, voir [104, Chapitre 7]. Plus généralement on peut considérer[34] $T = |p|^s$, $0 < s \leq 2$. Les cas notoirement exclus de la définition ci-dessus sont ceux avec champ magnétique $T = (p + A)^2$ et $T = |p + A|$, que l'on peut traiter avec les méthodes du corps de ces notes, mais pas celles de cet appendice.

Une conséquence importante du choix d'énergie cinétique fait ici est qu'on a par l'inégalité triangulaire

$$\langle \psi, T\psi \rangle \geq \langle |\psi|, T|\psi| \rangle$$

et donc l'énergie totale à N corps

$$\mathcal{E}_N[\Psi_N] = \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle$$

satisfait

$$\mathcal{E}_N[\Psi_N] \geq \mathcal{E}_N\left[|\Psi_N|\right].$$

L'énergie fondamentale peut donc se calculer en prenant uniquement des fonctions test positives

$$E(N) = \inf\left\{\mathcal{E}_N[\Psi_N], \Psi_N \in L^2_s(\mathbb{R}^{dN})\right\} = \inf\left\{\mathcal{E}_N[\Psi_N], \Psi_N \in L^2_s(\mathbb{R}^{dN}), \Psi_N \geq 0\right\}. \tag{A.4}$$

Cette remarque permet de démontrer un fait évoqué précédemment: le fondamental bosonique correspond avec le fondamental absolu dans le cas d'une énergie cinétique de forme (A.2), voir [106, Chapitre 3].

[34] Cf (1.24).

Rappellons que la fonctionnelle de Hartree est donnée par

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] = \langle u, Tu\rangle + \int_{\mathbb{R}^d} V|u|^2 + \frac{1}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 w(x-y)|u(y)|^2 dxdy$$

et son infimum noté e_{H}. Nous allons dans la suite de cet appendice prouver l'énoncé suivant, qui est une variante un peu affaiblie du Théorème 3.5:

Théorème A.2 (Dérivation de la théorie de Hartree, énoncé alternatif). *Sous les hypothèses précédentes, en particulier* (3.11) *et T à noyau positif au sens de la Définition A.1 on a*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} = e_{\mathrm{H}}.$$

Soit $\Psi_N \geq 0$ un fondamental de H_N réalisant l'infimum (A.4) *et*

$$\rho_N^{(n)}(x_1,\dots,x_n) := \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)}} |\Psi_N(x_1,\dots,x_N)|^2 \, dx_{n+1}\dots dx_N$$

sa n-ième densité réduite. Il existe une mesure de probabilité μ sur $\mathcal{M}_{\mathrm{H}}$ l'ensemble des minimiseurs de $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$ (modulo une phase), telle que, le long d'une sous-suite et pour tout $n\in\mathbb{N}$

$$\lim_{N\to\infty} \rho_N^{(n)} = \int_{\mathcal{M}_{\mathrm{H}}} \left|u^{\otimes n}\right|^2 d\mu(u) \tag{A.5}$$

fortement dans $L^1\left(\mathbb{R}^{dn}\right)$. En particulier, si e_{H} a un minimiseur unique (modulo une phase constante), alors pour toute la suite

$$\lim_{N\to\infty} \rho_N^{(n)} = \left|u_{\mathrm{H}}^{\otimes n}\right|^2. \tag{A.6}$$

Remarque A.3 (Unicité pour la théorie de Hartree).
Dans le cas d'une énérgie cinétique à noyau positif, l'unicité pour la théorie de Hartree est immédiate si $w\geq 0$. En effet, l'énergie cinétique $\langle\psi, T\psi\rangle$ est dans ce cas une fonction strictement convexe de $\rho = \sqrt{|\psi|^2}$, voir [104, Chapitre 7]. Si w est positif l'énergie $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$ est donc elle-même strictement convexe en ρ. □

Le cas particulier où $T=-\Delta$ a été obtenu par Kiessling dans [86], et nous suivrons sa méthode de preuve pour le cas général. Elle consiste à traiter le problème quantique comme un problème purement classique, ce qui explique que nous n'obtiendrons que la convergence des densités réduites (A.5) au lieu de celle des matrices de densité réduites (3.18). On continue dans la direction de (A.4) en écrivant

$$E(N) = \inf\left\{\mathcal{E}_N[\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N}], \boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{dN})\right\} \tag{A.7}$$

où $\boldsymbol{\mu}_N$ joue le rôle de $|\Psi_N|^2$ et on s'est servi du fait que l'on peut supposer $\Psi_N\geq 0$. L'objet que nous avons à traiter est une probabilité symétrique de N variables, et notre stratégie sera similaire à celle employée pour la preuve du Théorème (2.4):

- Puisque le problème est confiné, on pourra passer aisément à la limite et obtenir un problème pour un état classique à nombre infini de particules $\boldsymbol{\mu}\in\mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$. On utilisera alors le Théorème 2.1 pour décrire la limite $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ de $\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}$, pour tout n, par une unique mesure de probabilité $P_{\boldsymbol{\mu}}\in\mathcal{P}(\mathcal{P}(\mathbb{R}^d))$.

- Le point subtil est de démontrer que l'énergie limite est bien une fonction affine de $\boldsymbol{\mu}$, ce qui utilise de manière essentielle le fait que l'énergie cinétique est à noyau positif, ainsi que le Théorème de Hewitt-Savage.

Ces deux étapes sont contenues dans les deux sections suivantes. On concluera brièvement la preuve du Théorème A.2 dans une troisième section.

A.2. **Passage à la limite.**

Le problème limite que nous allons obtenir est décrit par la fonctionnelle (comparer avec (2.44))

$$\mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}] := \limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(n)}}\right) + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) d\boldsymbol{\mu}^{(1)}(x) + \frac{1}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y) d\boldsymbol{\mu}^{(2)}(x,y), \quad \text{(A.8)}$$

où $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$ et on a posé

$$T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_n}\right) := \left\langle \sqrt{\boldsymbol{\mu}_n}, \left(\sum_{j=1}^n T_j\right)\sqrt{\boldsymbol{\mu}_n}\right\rangle \quad \text{(A.9)}$$

pour toute mesure de probabilité $\boldsymbol{\mu}_n \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^{dn})$.

Lemme A.4 (**Passage à la limite**)**.**
Soit $\boldsymbol{\mu}_N \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{dN})$ réalisant l'infimum dans (A.7)*. Le long d'une sous-suite on a*

$$\boldsymbol{\mu}_N^{(n)} \rightharpoonup_* \boldsymbol{\mu}^{(n)} \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{dn})$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$, au sens des mesures. La suite $\left(\boldsymbol{\mu}^{(n)}\right)_{n\in\mathbb{N}}$ définit une mesure de probabilité $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$ et on a

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} \geq \mathcal{E}[\boldsymbol{\mu}]. \quad \text{(A.10)}$$

Preuve. L'extraction des limites $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ fonctionne comme en Section 2.3. L'existence de la mesure $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$ également, en utilisant le théorème de Kolmogorov.

Passer à la liminf dans les termes

$$\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^{dN}} V(x_j)\, d\boldsymbol{\mu}_N(x_1,\dots,x_N) = \int_{\mathbb{R}^d} V(x)\, d\boldsymbol{\mu}_N^{(1)}(x)$$

et

$$\frac{1}{N}\frac{1}{N-1}\sum_{1\leq i<j\leq N}^N \int_{\mathbb{R}^{dN}} w(x_i-x_j)\, d\boldsymbol{\mu}_N(x_1,\dots,x_N) = \frac{1}{2}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} w(x-y)\, d\boldsymbol{\mu}_N^{(2)}(x,y)$$

utilise les mêmes idées qu'aux Chapitres 2 et 3, nous n'élaborerons pas plus sur ce point.

Le point nouveau est le traitement de l'énergie cinétique en vue d'obtenir

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N}\right) \geq \limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(n)}}\right). \quad \text{(A.11)}$$

Pour ce faire, on note $\Psi_N = \boldsymbol{\mu}_N^2$ un minimiseur dans (A.4) et on a alors

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N}\right) &= \frac{1}{N}\operatorname{Tr}\left[\sum_{j=1}^{N} T_j \left|\Psi_N\right\rangle\left\langle\Psi_N\right|\right] \\ &= \frac{1}{n}\operatorname{Tr}\left[\sum_{j=1}^{n} T_j \gamma_N^{(n)}\right]\end{aligned}$$

où $\gamma_N^{(n)}$ est la n-ième matrice de densité reduite de Ψ_N. Il s'agit d'un opérateur à trace, que l'on décompose sous la forme

$$\gamma_N^{(n)} = \sum_{k=1}^{+\infty} \lambda_n^k |u_n^k\rangle\langle u_n^k|$$

avec u_n^k normalisé dans $L^2_s(\mathbb{R}^{dk})$ et $\sum_{k=1}^{\infty}\lambda_k^n = 1$. En insérant cette décomposition dans l'équation précédente et en rappellant (A.9) on obtient par linéarité de la trace

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N}\right) &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{+\infty}\lambda_n^k\, T\left(\sqrt{|u_n^k|^2}\right) \\ &\geq \frac{1}{n}T\left(\sqrt{\sum_{k=1}^{+\infty}\lambda_n^k|u_n^k|^2}\right) \\ &= \frac{1}{n}T\left(\sqrt{\rho_{\gamma_N^{(n)}}}\right)\end{aligned}$$

où l'inégalité utilise la convexité de l'énergie cinétique en la densité ρ, déjà rappellée à la Remarque A.3, cf [104, Chapitre 7]. Dans la dernière égalité

$$\rho_{\gamma_N^{(n)}} = \sum_{k=1}^{\infty}\lambda_n^k|u_n^k|^2$$

est la densité[35] de $\gamma_N^{(n)}$ et il est aisé de voir que

$$\rho_{\gamma_N^{(n)}} = \rho_N^{(n)} = \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)}} |\Psi_N(x_1,\dots,x_N)|^2 dx_{n+1}\dots dx_N,$$

ce qui donne

$$\frac{1}{N}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N}\right) \geq \frac{1}{n}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_N^{(n)}}\right).$$

Pour obtenir (A.11), il ne reste plus qu'à passer d'abord à la liminf en N (en utilisant le lemme de Fatou), puis à la limsup en n. □

La notion d'énergie cinétique à noyau positif est déjà cruciale à ce niveau. C'est elle qui garantit la propriété de convexité que nous venons d'utiliser. Elle va jouer un rôle encore plus important à la section suivante.

[35] Formellement, la partie diagonale du noyau.

A.3. **Le problème limite.** Il s'agit maintenant de montrer que la fonctionnelle (A.8) est affine sur $\mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$. Les deux derniers termes le sont évidemment, ce qui n'est pas surprenant puisque ce sont des termes de nature classique. Il suffit donc de montrer que le premier terme, qui encode l'aspect quantique du problème, est également linéaire en la densité:

Lemme A.5 (**Linéarité de l'énergie cinétique limite**).
La fonctionnelle

$$T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}}\right) := \limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(n)}}\right)$$

est affine sur $\mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$.

Kiessling [86] a donné une preuve très élégante de ce lemme dans le cas de l'énergie cinétique non relativitse. Il note que dans ce cas

$$\frac{1}{n} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(n)}}\right) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \int_{\mathbb{R}^{dn}} \left|\nabla_j \sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(n)}}\right|^2 = \frac{1}{4n}\sum_{j=1}^{n} \int_{\mathbb{R}^{dn}} \left|\nabla_j \log \boldsymbol{\mu}^{(n)}\right|^2 \boldsymbol{\mu}^{(n)}$$

et que la dernière expression est identique à l'information de Fisher de la mesure de probabilité $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$. Comme le nom "information" le suggère, cette quantité a une connexion intéressante avec l'entropie classique d'une mesure de probabilité. La quantité que nous étudions peut donc s'interpréter comme une "information de Fisher moyenne" de la mesure $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$, en analogie avec l'entropie moyenne introduite en (2.44).

En faisant évoluer $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ suivant le flot de la chaleur, on peut montrer qu'à chaque instant le long du flot, l'information de Fisher est la dérivée de l'entropie. Puisque le flot de la chaleur est linéaire et que l'entropie moyenne est affine (cf le calcul simple présenté lors de la preuve du Théorème 2.4, issu de [137]), Kiessling déduit que l'information de Fisher moyenne est affine.

On suivra ici une approche plus pédestre qui a l'avantage de s'adapter aux énergies cinétiques plus générales décrites à la Définition A.1, entre autres l'énergie cinétique pseudo-relativiste.

Preuve. Le Théorème 2.1 implique que $\mathcal{P}_s(\mathbb{R}^{d\mathbb{N}})$ est l'enveloppe convexe des mesures de probabilité symétriques caractérisées par $\boldsymbol{\mu}^{(n)} = \rho^{\otimes n}, \rho \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$. Pour prouver le lemme, il suffit donc de prendre

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \rho_1^{\otimes n}, \quad \boldsymbol{\mu}_2 = \rho_2^{\otimes n}, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2$$

avec $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$, $\rho_1 \neq \rho_2$ et de démontrer que

$$\left| T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}}\right) - \frac{1}{2} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_1}\right) - \frac{1}{2} T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_2}\right) \right| \leq o(n) \to 0 \tag{A.12}$$

quand $n \to \infty$. Par symétrie de $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ et au vu de la Définition A.1, il s'agit de calculer

$$T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}}\right) = n \int_{\mathbb{R}^{d(n-1)}} d\hat{X} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} T(x,y) \left|\sqrt{\boldsymbol{\mu}(X)} - \sqrt{\boldsymbol{\mu}(Y)}\right|^2, \tag{A.13}$$

où on a noté

$$X = (x_1, \ldots, x_n), \quad Y = (y_1, x_2 \ldots, x_n), \quad \hat{X} = (x_2, \ldots, x_n).$$

Nous commençons par prétendre que pour tout X, Y

$$|I(X,Y)| := \left| \left| \sqrt{\boldsymbol{\mu}(X)} - \sqrt{\boldsymbol{\mu}(Y)} \right|^2 - \frac{1}{2} \left| \sqrt{\boldsymbol{\mu}_1(X)} - \sqrt{\boldsymbol{\mu}_1(Y)} \right|^2 - \frac{1}{2} \left| \sqrt{\boldsymbol{\mu}_2(X)} - \sqrt{\boldsymbol{\mu}_2(Y)} \right|^2 \right|$$
$$\leq C \left(\prod_{j=2}^{n} \rho_1(x_j)\rho_2(x_j) \right)^{1/2} \left(\left| \sqrt{\rho_1}(x_1) - \sqrt{\rho_1(y_1)} \right|^2 + \left| \sqrt{\rho_2}(x_1) - \sqrt{\rho_2(y_1)} \right|^2 \right). \tag{A.14}$$

Nous allons prouver (A.14) dans le cas

$$\rho_2(y_1) \leq \rho_2(x_1) \text{ et } \rho_1(y_1) \leq \rho_1(x_1) \tag{A.15}$$

en laissant au lecteur les adaptation simples nécessaires pour les autres cas. En développant les carrés et en notant $U_i = \sqrt{\rho_i^{\otimes n}}$ on obtient

$$2I(X,Y) = U_1(X)U_1(Y) + U_2(X)U_2(Y) - \sqrt{U_1^2(X)U_1^2(Y) + U_2^2(X)U_2^2(Y) + U_1^2(X)U_2^2(Y) + U_2^2(X)U_1^2(Y)}.$$

Ensuite

$$U_1^2(X)U_1^2(Y) + U_2^2(X)U_2^2(Y) + U_1^2(X)U_2^2(Y) + U_2^2(X)U_1^2(Y)$$
$$= (U_1(X)U_1(Y) + U_2(X)U_2(Y))^2 + U_1^2(X)U_2^2(Y) + U_2^2(X)U_1^2(Y) - 2U_1(X)U_2(Y)U_1(Y)U_2(X)$$

et donc, avec $u_i = \sqrt{\rho_i}$

$$\begin{aligned}
2|I(X,Y)| &= |(U_1(X)U_1(Y) + U_2(X)U_2(Y)) \\
&\quad \times \left(1 - \sqrt{1 + \frac{U_1^2(X)U_2^2(Y) + U_2^2(X)U_1^2(Y) - 2U_1(X)U_2^2(Y)U_1(Y)U_2(X)}{(U_1(X)U_1(Y) + U_2(X)U_2(Y))^2}} \right) \Bigg| \\
&\leq \frac{U_1^2(X)U_2^2(Y) + U_2^2(X)U_1^2(Y) - 2U_1(X)U_2^2(Y)U_1(Y)U_2(X)}{U_1(X)U_1(Y) + U_2(X)U_2(Y)} \\
&= \left(\prod_{j=2}^{n} u_1(x_j)u_2(x_j) \right) \frac{|u_1(x_1)u_2(y_1) - u_1(y_1)u_2(x_1)|^2}{u_1(x_1)u_1(y_1) + u_2(x_1)u_2(y_1)} \\
&= \left(\prod_{j=2}^{n} u_1(x_j)u_2(x_j) \right) \frac{|u_2(y_1)\,(u_1(x_1) - u_1(y_1)) + u_1(y_1)\,(u_2(y_1) - u_2(x_1))|^2}{u_1(x_1)u_1(y_1) + u_2(x_1)u_2(y_1)} \\
&\leq 2 \left(\prod_{j=2}^{n} u_1(x_j)u_2(x_j) \right) \left(\frac{u_2(y_1)^2}{u_1(x_1)u_1(y_1) + u_2(x_1)u_2(y_1)} \,(u_1(x_1) - u_1(y_1))^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{u_1(y_1)^2}{u_1(x_1)u_1(y_1) + u_2(x_1)u_2(y_1)} \,(u_2(y_1) - u_2(x_1))^2 \right).
\end{aligned}$$

L'estimation (A.14) suit immédiatement dans le cas (A.15) et par des considérations similaires dans les autres cas.

En insérant (A.14) dans (A.13) et en rappellant (A.9) on obtient

$$\left| T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}}\right) - \frac{1}{2}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_1}\right) - \frac{1}{2}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_2}\right) \right| \leq Cn \left(\int_{\mathbb{R}^d} \sqrt{\rho_1}\sqrt{\rho_2} \right)^{n-1} \left(T\left(\sqrt{\rho_1}\right) + T\left(\sqrt{\rho_2}\right) \right)$$

par Fubini. On peut supposer que $T\left(\sqrt{\rho_1}\right)$ et $T\left(\sqrt{\rho_2}\right)$ sont finis, sinon toutes les quantités que nous évaluons sont égales à $+\infty$ et il n'y rien à prouver. Il reste à noter que

$$\delta := \int_{\mathbb{R}^d} \sqrt{\rho_1}\sqrt{\rho_2} < \frac{1}{2}\left(\int_{\mathbb{R}^d} \rho_1 + \int_{\mathbb{R}^d} \rho_2 \right) < 1$$

puisque $\rho_1 \neq \rho_2$ par hypothèse. On conclut que

$$\left| T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}}\right) - \frac{1}{2}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_1}\right) - \frac{1}{2}T\left(\sqrt{\boldsymbol{\mu}_2}\right) \right| \leq Cn\delta^{n-1}$$

et $\delta^{n-1} \to 0$ quand $n \to +\infty$, comme désiré. □

A.4. **Conclusion.**

La borne supérieure est comme d'habitude triviale en prenant un état test factorisé. En combinant les Lemmes A.4 et A.5 ainsi que la représentation de $\boldsymbol{\mu}$ donnée par le Théorème 2.1 on déduit

$$\begin{aligned} \liminf_{N\to\infty} \frac{E(N)}{N} &= \mathcal{E}\left[\int_{\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)} \rho^{\otimes\infty} \mathrm{d}\mu(\rho) \right] \\ &= \int_{\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)} \mathcal{E}\left[\rho^{\otimes\infty}\right] \mathrm{d}\mu(\rho) \\ &= \int_{\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}\left[\sqrt{\rho}\right] \mathrm{d}\mu(\rho) \geq \int_{\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)} e_{\mathrm{H}} \mathrm{d}\mu(\rho) = e_{\mathrm{H}}, \end{aligned}$$

ce qui fournit la convergence de l'énergie. La convergence des densités réduites suit en notant qu'il doit y avoir égalité dans toutes les inégalités précédentes.

Appendice B. **Bosons en dimension finie à grande température**

Nous avons jusqu'à présent considéré des systèmes quantiques de champ moyen uniquement à température nulle, et obtenu quand $N \to \infty$ des mesures de de Finetti concentrées sur les minimiseurs de la fonctionnelle d'énergie limite. Il est possible, en prenant une limite de grande température en même temps que la limite de champ moyen, d'obtenir une mesure de Gibbs à la limite. Dans cet appendice nous expliquerons ceci pour le cas de bosons dans un espace de dimension finie, en suivant [74, 101].

En dimension inifinie, des problèmes importants se posent, notamment pour la définition du problème limite. Les mesures de Gibbs non linéaires qu'on obtient jouent un rôle important en théorie quantique des champs [47, 153, 165, 72] et dans la construction de solutions peu régulières à l'équation de Schrödinger non linéaire, voir par exemple [93, 19, 20, 167, 24, 23, 166, 45]. On renvoie à l'article en préparation [98] pour des résultats sur la limite "champ moyen/grande température en dimension infinie" et une discussion plus poussée de ces sujets.

B.1. **Cadre et résultat.**

Dans cet appendice l'espace à une particule sera un espace de Hilbert $\mathfrak{H}$ de dimension finie

$$\dim \mathfrak{H} = d.$$

On considère le Hamiltonien de type champ moyen

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} h_j + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} w_{ij} \tag{B.1}$$

où h est un opérateur linéaire sur $\mathfrak{H}$ et w un opérateur linéaire sur $\mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H}$ symétrique au sens où

$$w(u \otimes v) = w(v \otimes u), \quad \forall u, v \in \mathfrak{H}.$$

La fonctionnelle d'énergie est comme d'habitude définie par

$$\mathcal{E}_N[\Psi_N] = \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle$$

pour $\Psi_N \in \bigotimes_s^N \mathfrak{H}$ et s'étend aux états mixtes Γ_N de $\mathfrak{H}^N = \bigotimes_s^N \mathfrak{H}$ par la formule

$$\mathcal{E}_N[\Gamma_N] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}^N} \left[H_N \Gamma_N \right].$$

L'état d'équilibre du sytème à température T est obtenu en minimisant la fonctionnelle d'énergie libre

$$\mathcal{F}_N[\Gamma_N] := \mathcal{E}_N[\Gamma_N] + T \,\mathrm{Tr}\left[\Gamma_N \log \Gamma_N\right] \tag{B.2}$$

parmi les états mixtes, ce qui donne pour minimiseur l'état de Gibbs

$$\Gamma_N = \frac{\exp\left(-T^{-1} H_N\right)}{\mathrm{Tr}\left[\exp\left(-T^{-1} H_N\right)\right]}. \tag{B.3}$$

L'énergie libre minimum est obtenue à partir de la fonction de partition (facteur de normalisation dans (B.3)) comme suit:

$$F_N = \inf\left\{\mathcal{F}_N[\Gamma_N], \Gamma_N \in \mathcal{S}(\mathfrak{H}^N)\right\} = -T \log \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\frac{1}{T} H_N\right)\right]. \tag{B.4}$$

On va s'intéresser au comportement de ces objets dans la limite

$$N \to \infty, \quad T = tN, \quad t \text{ fixe} \tag{B.5}$$

qui se trouve être le bon régime pour obtenir un problème limite intéressant. On va en fait obtenir à la limite une fonctionnelle d'énergie libre classique, que nous définissons maintenant.

Puisque $\mathfrak{H}$ est de dimension finie, on peut définir du la mesure de Lebesgues normalisée sur sa sphère unité $S\mathfrak{H}$. Les objets limites seront des mesures de de Finetti, donc des mesures de probabilité μ sur $S\mathfrak{H}$, et plus précisément des fonctions $L^1(S\mathfrak{H}, du)$. On introduit pour ces objets une fonctionnelle d'énergie libre classique

$$\mathcal{F}_{\mathrm{cl}}[\mu] = \int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]\mu(u)du + t\int_{S\mathfrak{H}} \mu(u)\log\left(\mu(u)\right)du \tag{B.6}$$

dont on notera F_{cl} l'infimum parmi les fonctions L^1 positives et normalisées. Il est atteint par la mesure de Gibbs classique

$$\mu_{\mathrm{cl}} = \frac{\exp\left(-t^{-1}\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]\right)}{\int_{S\mathfrak{H}} \exp\left(-t^{-1}\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]\right)du} \tag{B.7}$$

et on a

$$F_{\mathrm{cl}} = -t\log\left(\int_{S\mathfrak{H}} \exp\left(-\frac{1}{t}\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]\right)du\right)$$

Ici $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]$ est la fonctionnelle d'énergie de Hartree

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u] = \frac{1}{N}\left\langle u^{\otimes N}, H_N u^{\otimes N}\right\rangle_{\mathfrak{H}^N} = \langle u, hu\rangle_{\mathfrak{H}} + \frac{1}{2}\left\langle u\otimes u, wu\otimes u\right\rangle_{\mathfrak{H}^2}. \tag{B.8}$$

Le théorème que nous allons démontrer, dû à Gottlieb [74] est de nature semi-classique puisqu'il fait le lien entre les mesures de Gibbs quantique (B.3) et classique (B.7):

Théorème B.1 (**Limite champ moyen/grande température en dimension finie**)**.**

Dans la limite (B.5)*, on a*

$$F_N = -T\log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + NF_{\mathrm{cl}} + O(d). \tag{B.9}$$

De plus, en notant $\gamma_N^{(n)}$ *la n-ième matrice de densité réduite de l'état de Gibbs* (B.3)*,*

$$\gamma_N^{(n)} \to \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}|\mu_{\mathrm{cl}}(u)du \tag{B.10}$$

fortement en norme de trace sur $\mathfrak{H}^n$*.*

Remarque B.2 (Limite de champ moyen/grande température).
Quelques commentaires:

(1) Il faut comprendre ce théorème comme disant que essentiellemnt, dans la limite qui nous intéresse

$$\Gamma_N \approx \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\mu_{\mathrm{cl}}(u)du.$$

L'état de Gibbs est donc essentiellement une superposition d'états de Hartree. Les notions de matrices de densités réduites et de mesures de de Finetti donnent la

bonne manière de rendre ceci rigoureux. On verra que la mesure de de Finetti (symbole inférieur) associé à Γ_N par les méthodes du Chapitre 4 converge vers $\mu_{\rm cl}(u)du$.

(2) Notons que le premier terme dans l'expansion d'énergie (B.9) diverge très rapidement, voir (4.16). L'énergie libre classique apparaît seulement comme une correction. Vue la dépendence en la dimension d de ce premier terme, il est clair que l'approche de cet appendice ne peut s'adapter telle quelle dans un espace de dimension infinie.

(3) Notre méthode de preuve diffèrera de celle de [74]. On exploitera plus à fond le caractère semi-classique du problème en utilisant les inégalités de Berezin-Lieb introduites dans [13, 102], voir aussi [156]. La méthode présentée [101] doit beaucoup à l'article fondateur [102] et rappelle certains aspects de [110].

(4) Il sera crucial pour cette preuve que le symbole inférieur de Γ_N constitue une mesure de de Finetti approchée pour Γ_N. Cela nous permettra d'appliquer la première inégalité de Berezin-Lieb pour obtenir une borne inférieure sur l'entropie. Un nouvel intérêt des constructions du Chapitre 4 se révèle donc dans cet appendice où on utilise non seulement l'estimation fournie par le Théorème 4.1 mais également la forme particulière de la mesure construite.

□

B.2. **Inégalités de Berezin-Lieb.**

On rappelle la décomposition de l'identité (4.5) sur $\mathfrak{H}^N$ fournie par le lemme de Schur. On a donc pour chaque état $\Gamma_N \in \mathcal{S}(\mathfrak{H}_s^N)$ un symbole inférieur défini comme

$$\mu_N = \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \mathrm{Tr}\left[\Gamma_N |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\right].$$

La première inégalité de Berezin-Lieb est l'énoncé suivant

Lemme B.3 (**Première inégalité de Berezin-Lieb**).
Soit $\Gamma_N \in \mathcal{S}(\mathfrak{H}_s^N)$ de symbole inférieur μ_N et $f : \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ une fonction convexe. On a

$$\mathrm{Tr}\left[f(\Gamma_N)\right] \geq \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} f\left(\frac{\mu_N}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) du. \tag{B.11}$$

La seconde inégalité de Berezin-Lieb s'applique à des états ayant un symbole supérieur positif (voir Section 4.2). On peut en fait montrer que tout état a un symbole supérieur, mais il n'est en général pas donné par une mesure positive.

Lemme B.4 (**Seconde inégalité de Berezin-Lieb**).
Soit $\Gamma_N \in \mathcal{S}(\mathfrak{H}_s^N)$ de symbole supérieur $\mu_N \geq 0$,

$$\Gamma_N = \int_{u\in S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}| \mu_N(u) du \tag{B.12}$$

et $f : \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ une fonction convexe. On a

$$\mathrm{Tr}\left[f(\Gamma_N)\right] \leq \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} f\left(\frac{\mu_N}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) du. \tag{B.13}$$

Preuve des Lemmes B.3 et B.4. On suit [156]. Comme Γ_N est un état, on le décompose sous la forme

$$\Gamma_N = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_N^k |V_N^k\rangle\langle V_N^k|$$

avec $V_N^k \in \mathfrak{H}_s^N$ normalisé et $\sum_k \lambda_N^k = 1$. On note

$$\mu_N^k(u) = \left|\left\langle V_N^K, u^{\otimes N}\right\rangle\right|^2$$

et par (4.5) on a

$$\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} \mu_N^k(u)du = \left\langle V_N^K, V_N^k\right\rangle = 1. \tag{B.14}$$

D'autre part, comme $(V_N^k)_k$ est une base de $\mathfrak{H}_s^N$, pour tout $u \in S\mathfrak{H}$

$$\sum_k \mu_N^k(u) = \sum_k \left|\left\langle V_N^K, u^{\otimes N}\right\rangle\right|^2 = 1. \tag{B.15}$$

Première inégalité. Ici μ_N est le symbole inférieur de Γ_N et on a

$$\mu_N(u) = \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \sum_k \lambda_N^k \mu_N^k(u)$$

et donc

$$\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} f\left(\frac{\mu_N}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) du \leq \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} \sum_k f\left(\lambda_N^k\right) \mu_N^k(u)du$$

par l'inégalité de Jensen et (B.15), puis

$$\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} \sum_k f\left(\lambda_N^k\right) \mu_N^k(u)du = \sum_k f\left(\lambda_N^k\right) = \mathrm{Tr}\left[f(\Gamma_N)\right]$$

par (B.14).

Seconde inégalité. Ici Γ_N et μ_N sont reliés par (B.12). On écrit

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\left[f(\Gamma_N)\right] = \sum_k f\left(\lambda_N^k\right) &= \sum_k f\left(\langle V_N^k, \Gamma_N V_N^k\rangle\right) \\
&= \sum_k f\left(\int_{S\mathfrak{H}} \mu_N(u)\mu_N^k(u)du\right) \\
&\leq \sum_k \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} f\left(\frac{\mu_N(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) \mu_N^k(u)du \\
&= \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} f\left(\frac{\mu_N(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) du
\end{aligned}$$

en utilisant l'inégalité de Jensen et (B.14) pour montrer l'inégalité et (B.15) pour conclure. □

Nous avons présenté ici une version spécifique de ces fameuses inégalités. Il est clair que la preuve s'applique plus généralement à tout opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert disposant d'une décomposition en états cohérents de forme (4.5). Dans la section suivante ces inégalités serviront à traiter le terme d'entropie en prenant $f(x) = x \log x$.

Ceci complétera le traitement de l'énergie utilisant le Théorème 4.1 et fera le lien avec les considérations présentées au Chapitre 4.

B.3. **Preuve du Théorème B.1.**
Borne supérieure. On prend comme état test

$$\Gamma_N^{\rm test} := \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\, \mu_{\rm cl}(u)du.$$

L'énergie étant linéaire en la matrice densité

$$\mathcal{E}_N\left[\Gamma_N^{\rm test}\right] = \int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_N\left[|u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\right] \mu_{\rm cl}(u)du = N\int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\rm H}[u]\mu_{\rm cl}(u)du.$$

Pour le terme d'entropie on utilise la seconde inégalité de Berezin-Lieb, Lemme B.4, avec $f(x) = x\log x$, ce qui donne

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}\left[\Gamma_N^{\rm test}\log\Gamma_N^{\rm test}\right] &\leq \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)\int_{S\mathfrak{H}} \frac{\mu_{\rm cl}(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\log\left(\frac{\mu_{\rm cl}(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right)du \\ &= -\log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + \int_{S\mathfrak{H}} \mu_{\rm cl}(u)\log\left(\mu_{\rm cl}(u)\right)du.\end{aligned}$$

En sommant ces estimations on obtient

$$F_N \leq \mathcal{F}_N\left[\Gamma_N^{\rm test}\right] \leq -T\log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + NF_{\rm cl}$$

puisque $\mu_{\rm cl}$ minimise $\mathcal{F}_{\rm cl}$.

Borne inférieure. Pour l'énergie on utilise les matrices de densité réduites comme d'habitude pour écrire

$$\mathcal{E}_N[\Gamma_N] = N\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[h\gamma_N^{(1)}\right] + \frac{N}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w\gamma_N^{(2)}\right].$$

En notant

$$\mu_N(u) = \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)\left\langle u^{\otimes N}, \Gamma_N u^{\otimes N}\right\rangle$$

le symbole inférieur de Γ_N, on rappelle qu'il a été démontré au Chapitre 4 que

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left|\gamma_N^{(1)} - \int_{S\mathfrak{H}} |u\rangle\langle u|\mu_N(u)du\right| &\leq C_1\frac{d}{N} \\ \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left|\gamma_N^{(2)} - \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\mu_N(u)du\right| &\leq C_2\frac{d}{N}.\end{aligned}$$

Puisque nous travaillons en dimension finie, h et w sont des opérateurs bornés et il s'ensuit que

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_N[\Gamma_N] &\geq N\int_{S\mathfrak{H}} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[h|u\rangle\langle u|\right]\mu_N(u)du + \frac{N}{2}\int_{S\mathfrak{H}} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[w|u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\right]\mu_N(u)du - Cd \\ &= N\int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}_{\rm H}[u]\mu_N(u)du - Cd.\end{aligned}$$

Pour estimer l'entropie on utilise la première inégalité de Berezin-Lieb, Lemme B.3, avec $f(x) = x \log x$, ce qui donne

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}\left[\Gamma_N \log \Gamma_N\right] &\geq \dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) \int_{S\mathfrak{H}} \frac{\mu_N(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)} \log\left(\frac{\mu_N(u)}{\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right)}\right) du \\ &= -\log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + \int_{S\mathfrak{H}} \mu_N(u) \log\left(\mu_N(u)\right) du.\end{aligned}$$

Il ne reste qu'à grouper ces estimations pour déduire

$$\begin{aligned}F_N = \mathcal{F}_N[\Gamma_N] &\geq -T \log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + N\mathcal{F}_{\mathrm{cl}}[\mu_N] - Cd \\ &\geq -T \log\dim\left(\mathfrak{H}_s^N\right) + NF_{\mathrm{cl}} - Cd\end{aligned}$$

puisque

$$\int_{S\mathfrak{H}} \mu_N(u) du = 1$$

par définition.

Convergence des matrices de densité réduites. Le symbole inférieur $\mu_N(u)du$ est une mesure de probailité sur l'espace compact $S\mathfrak{H}$. On en extrait une sous-suite convergente

$$\mu_N(u)du \to \mu(du) \in \mathcal{P}(S\mathfrak{H})$$

et il s'ensuit des résultats du Chapitre 4 que, pout tout $n \geq 0$ et le long d'une sous-suite,

$$\gamma_N^{(n)} \to \int_{S\mathfrak{H}} |u^{\otimes n}\rangle\langle u^{\otimes n}| d\mu(u). \tag{B.16}$$

Les estimations d'énergie précédentes une fois combinées donnent

$$F_{\mathrm{cl}} \geq \mathcal{F}_{\mathrm{cl}}[\mu_N] - C\frac{d}{N}. \tag{B.17}$$

Pour passer à la liminf $N \to \infty$ dans cette estimation, le terme d'énergie est traitée comme dans les chapitres précédents. Pour le terme d'entropie on remarque que comme du est normalisée

$$\int_{S\mathfrak{H}} \mu_N \log \mu_N du \geq 0$$

puisque cette quantité peut s'interpréter comme l'entropie relative de μ_N par rapport à la fonction constante 1. Par le lemme de Fatou on déduit donc de (B.17) que

$$F_{\mathrm{cl}} \geq \mathcal{F}_{\mathrm{cl}}[\mu]$$

et donc que $d\mu(u) = \mu_{\mathrm{cl}}(u)du$ par unicité du minimiseur de $\mathcal{F}_{\mathrm{cl}}$. L'unicité de la limite garantit également que toute la suite converge, et il ne reste qu'à revenir à (B.16) pour conclure. □

Références

[1] A. Aftalion, *Vortices in Bose–Einstein Condensates*, vol. 67 of Progress in nonlinear differential equations and their applications, Springer, 2006.

[2] Z. Ammari, *Scattering theory for a class of fermionic Pauli-Fierz models*, J. Funct. Anal., 208 (2004), pp. 302–359.

[3] ———, *Systèmes hamiltoniens en théorie quantique des champs : dynamique asymptotique et limite classique.* Habilitation à Diriger des Recherches, University of Rennes I, February 2013.

[4] Z. Ammari and F. Nier, *Mean field limit for bosons and infinite dimensional phase-space analysis*, Annales Henri Poincaré, 9 (2008), pp. 1503–1574. 10.1007/s00023-008-0393-5.
[5] ———, *Mean field limit for bosons and propagation of Wigner measures*, J. Math. Phys., 50 (2009).
[6] ———, *Mean field propagation of Wigner measures and BBGKY hierarchies for general bosonic states*, J. Math. Pures Appl., 95 (2011), pp. 585–626.
[7] G. Anderson, A. Guionnet, and O. Zeitouni, *An introduction to random matrices*, Cambridge University Press, 2010.
[8] W. Aschbacher, J. Fröhlich, G. Graf, K. Schnee, and M. Troyer, *Symmetry breaking regime in the nonlinear hartree equation*, J. Math. Phys., 43 (2002), pp. 3879–3891.
[9] C. Bardos, F. Golse, and N. J. Mauser, *Weak coupling limit of the N-particle Schrödinger equation*, Methods Appl. Anal., 7 (2000), pp. 275–293.
[10] G. Ben Arous and A. Guionnet, *Large deviations for Wigner's law and Voiculescu's noncommutative entropy*, Probab. Theory Related Fields, 108 (1997), pp. 517–542.
[11] G. Ben Arous and O. Zeitouni, *Large deviations from the circular law*, ESAIM: Probability and Statistics, 2 (1998), pp. 123–134.
[12] R. Benguria and E. H. Lieb, *Proof of the Stability of Highly Negative Ions in the Absence of the Pauli Principle*, Physical Review Letters, 50 (1983), pp. 1771–1774.
[13] F. A. Berezin, *Convex functions of operators*, Mat. Sb. (N.S.), 88(130) (1972), pp. 268–276.
[14] V. Betz and D. Ueltschi, *Critical temperature of dilute bose gases*, Phys. Rev. A, 81 (2010), p. 023611.
[15] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Many-body physics with ultracold gases*, Rev. Mod. Phys., 80 (2008), p. 885.
[16] Bose, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Zeitschrift fur Physik, 26 (1924), pp. 178–181.
[17] P. Bourgade, L. Erdös, and H.-T. Yau, *Universality of general β-ensembles*, ArXiv e-prints, (2009).
[18] ———, *Bulk universality of general β-ensembles with non-convex potential*, J. Math. Phys., 53 (2012), p. 095221.
[19] J. Bourgain, *Periodic nonlinear Schrödinger equation and invariant measures*, Comm. Math. Phys., 166 (1994), pp. 1–26.
[20] ———, *Invariant measures for the 2d-defocusing nonlinear Schrödinger equation*, Comm. Math. Phys., 176 (1996), pp. 421–445.
[21] A. Boutet de Monvel, L. Pastur, and M. Shcherbina, *On the statistical mechanics approach in the random matrix theory: integrated density of states*, J. Stat. Phys., 79 (1995), pp. 585–611.
[22] F. Brandão and A. Harrow, *Quantum de Finetti theorems under local measurements with applications*, Proc. of the 45th ACM Symposium on theory of computing (STOC 2013), pp. 861-870, (2013), pp. 861–870.
[23] N. Burq, L. Thomann, and N. Tzvetkov, *Long time dynamics for the one dimensional non linear Schrödinger equation*, ArXiv e-prints, (2010).
[24] N. Burq and N. Tzvetkov, *Random data Cauchy theory for supercritical wave equations. I. Local theory*, Invent. Math., 173 (2008), pp. 449–475.
[25] E. Caglioti, P.-L. Lions, C. Marchioro, and M. Pulvirenti, *A special class of stationary flows for two-dimensional Euler equations: a statistical mechanics description*, Comm. Math. Phys., 143 (1992), pp. 501–525.
[26] E. Carlen, R. Frank, and E. Lieb, *Stability estimates for the lowest eigenvalue of a Schrödinger operator*, Geom. Func. Anal., (2014).
[27] D. Chafaï, N. Gozlan, and P.-A. Zitt, *First order global asymptotics for calogero-sutherland gases*, ArXiv e-prints, (2013).
[28] T. Chen, C. Hainzl, N. Pavlović, and R. Seiringer, *On the well-posedness and scattering for the Gross-Pitaevskii hierarchy via quantum de Finetti*, Lett. Math. Phys., 104 (2014), pp. 871–891.
[29] ———, *Unconditional uniqueness for the cubic Gross-Pitaevskii hierarchy via quantum de Finetti*, Comm. Pure. Appl. Math., (2014).
[30] F. Chevy and J. Dalibard, *Les condensats de Bose-Einstein*, Bulletin de la Société Française de Physique, 142 (2003).

[31] G. Chiribella, *On quantum estimation, quantum cloning and finite quantum de Finetti theorems*, in Theory of Quantum Computation, Communication, and Cryptography, vol. 6519 of Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2011.
[32] M. Christandl, R. König, G. Mitchison, and R. Renner, *One-and-a-half quantum de Finetti theorems*, Comm. Math. Phys., 273 (2007), pp. 473–498.
[33] M. Christiandl and B. Toner, *Finite de finetti theorem for conditional probability distributions describing physical theories*, J. Math. Phys., 50 (2009), p. 042104.
[34] J. Cirac and R. Renner, *de Finetti Representation Theorem for Infinite-Dimensional Quantum Systems and Applications to Quantum Cryptography*, Phys. Rev. Lett., 102 (2009), p. 110504.
[35] C. Cohen-Tannoudji, J. Dalibard, and F. Laloë, *La condensation de bose-einstein dans les gaz*, Einstein aujourd'hui, CNRS Editions et EDP Sciences, (2005).
[36] A. Coleman and V. Yukalov, *Reduced Density Matrices: Coulson's Challenge*, Springer Verlag, 2000.
[37] J. Combes, R. Schrader, and R. Seiler, *Classical bounds and limits for energy distributions of Hamilton operators in electromagnetic fields*, Annals of Physics, 111 (1978), pp. 1 – 18.
[38] N. R. Cooper, *Rapidly rotating atomic gases*, Advances in Physics, 57 (2008), pp. 539–616.
[39] H. D. Cornean, J. Derezinski, and P. Zin, *On the infimum of the energy-momentum spectrum of a homogeneous bose gas*, J. Math. Phys., 50 (2009), p. 062103.
[40] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys., 71 (1999), pp. 463–512.
[41] J. Dalibard, *La condensation de Bose-Einstein en phase gazeuse*, Images de la Physique, (2001).
[42] J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeliūnas, and P. Öhberg, *Artificial gauge potentials for neutral atoms*, Rev. Mod. Phys., 83 (2011), p. 1523.
[43] B. de Finetti, *Funzione caratteristica di un fenomeno aleatorio*. Atti della R. Accademia Nazionale dei Lincei, 1931. Ser. 6, Memorie, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali.
[44] ———, *La prévision, ses lois logiques, ses sources subjectives*, Annales de l'IHP, 7 (1937), pp. 1–68.
[45] A.-S. de Suzzoni, *Invariant measure for the cubic wave equation on the unit ball of 3*, Dyn. Partial Differ. Equ., 8 (2011), pp. 127–147.
[46] G. dell'Antonio, *On the limits of sequences of normal states*, Comm. Pure Appl. Math., 20 (1967), p. 413.
[47] J. Dereziński, *Quantum fields with classical perturbations*, arXiv eprints, (2013).
[48] J. Dereziński and C. Gérard, *Asymptotic completeness in quantum field theory. Massive Pauli-Fierz Hamiltonians*, Rev. Math. Phys., 11 (1999), pp. 383–450.
[49] J. Dereziński and M. Napiórkowski, *Excitation spectrum of interacting bosons in the mean-field infinite-volume limit*, ArXiv e-prints, (2013).
[50] P. Diaconis and D. Freedman, *Finite exchangeable sequences*, Ann. Probab., 8 (1980), pp. 745–764.
[51] E. B. Dynkin, *Classes of equivalent random quantities*, Uspehi Matem. Nauk (N.S.), 8 (1953), pp. 125–130.
[52] F. J. Dyson, *Ground-state energy of a hard-sphere gas*, Phys. Rev., 106 (1957), pp. 20–26.
[53] ———, *Statistical theory of the energy levels of a complex system. part i*, J. Math. Phys., 3 (1962), pp. 140–156.
[54] ———, *Statistical theory of the energy levels of a complex system. part ii*, J. Math. Phys., 3 (1962), pp. 157–165.
[55] ———, *Statistical theory of the energy levels of a complex system. part iii*, J. Math. Phys., 3 (1962), pp. 166–175.
[56] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., 1924, pp. 261–267.
[57] A. Elgart, L. Erdős, B. Schlein, and H.-T. Yau, *Gross-Pitaevskii equation as the mean field limit of weakly coupled bosons*, Arch. Ration. Mech. Anal., 179 (2006), pp. 265–283.
[58] A. Elgart and B. Schlein, *Mean field dynamics of boson stars*, Comm. Pure Appl. Math., 60 (2007), pp. 500–545.
[59] V. Enss, *A note on Hunziker's theorem*, Commun. Math. Phys., 52 (1977), pp. 233–238.

[60] ———, *Asymptotic completeness for quantum mechanical potential scattering. I. Short range potentials*, Commun. Math. Phys., 61 (1978), pp. 285–291.
[61] L. Erdös, B. Schlein, and H.-T. Yau, *Derivation of the cubic non-linear Schrödinger equation from quantum dynamics of many-body systems*, Invent. Math., 167 (2007), pp. 515–614.
[62] ———, *Rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii equation with a large interaction potential*, J. Amer. Math. Soc., 22 (2009), pp. 1099–1156.
[63] M. Fannes, H. Spohn, and A. Verbeure, *Equilibrium states for mean field models*, J. Math. Phys., 21 (1980), pp. 355–358.
[64] M. Fannes and C. Vandenplas, *Finite size mean-field models*, J. Phys. A, 39 (2006), pp. 13843–13860.
[65] A. Fetter, *Rotating trapped Bose-Einstein condensates*, Rev. Mod. Phys., 81 (2009), p. 647.
[66] P. Forrester, *Log-gases and random matrices*, London Mathematical Society Monographs Series, Princeton University Press, 2004.
[67] R. L. Frank, *Ground states of semi-linear pdes*. Lecture notes, 2014.
[68] D. Freedman, *A remark on the difference between sampling with and without replacement*, Journal of the American Statistical Association, 73 (1977), p. 681.
[69] J. Fröhlich, A. Knowles, and S. Schwarz, *On the mean-field limit of bosons with Coulomb two-body interaction*, Commun. Math. Phys., 288 (2009), pp. 1023–1059.
[70] J. Ginibre, *Statistical ensembles of complex, quaternion, and real matrices*, J. Math. Phys., 6 (1965), pp. 440–449.
[71] J. Ginibre and G. Velo, *The classical field limit of scattering theory for nonrelativistic many-boson systems. I*, Commun. Math. Phys., 66 (1979), pp. 37–76.
[72] J. Glimm and A. Jaffe, *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*, Springer-Verlag, 1987.
[73] F. Golse, *On the Dynamics of Large Particle Systems in the Mean Field Limit*, ArXiv e-prints, (2013).
[74] A. D. Gottlieb, *Examples of bosonic de Finetti states over finite dimensional Hilbert spaces*, J. Stat. Phys., 121 (2005), pp. 497–509.
[75] P. Grech and R. Seiringer, *The excitation spectrum for weakly interacting bosons in a trap*, ArXiv e-prints, (2012).
[76] Y. Guo and R. Seiringer, *Symmetry breaking and collapse in Bose-Einstein condensates with attractive interactions*, ArXiv e-prints, (2013).
[77] C. Hainzl, M. Lewin, and J. P. Solovej, *The thermodynamic limit of quantum Coulomb systems. Part I (General Theory) and II (Applications)*, Advances in Math., 221 (2009), pp. 454–487 and 488–546.
[78] A. Harrow, *The church of the symmetric subspace*, preprint arXiv, (2013).
[79] M. Hauray and S. Mischler, *On Kac's chaos and related problems*, J. Func. Anal., 266 (2014), pp. 6055–6157.
[80] K. Hepp, *The classical limit for quantum mechanical correlation functions*, Comm. Math. Phys., 35 (1974), pp. 265–277.
[81] E. Hewitt and L. J. Savage, *Symmetric measures on Cartesian products*, Trans. Amer. Math. Soc., 80 (1955), pp. 470–501.
[82] 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.
[83] A. Y. Khintchine, *Sur les classes d'évènements équivalents*, Mat. Sbornik, 39 (1932), pp. 40–43.
[84] M. K.-H. Kiessling, *On the equilibrium statistical mechanics of isothermal classical self-gravitating matter*, Jour. Stat. Phys., 55 (1989), pp. 203–257.
[85] ———, *Statistical mechanics of classical particles with logarithmic interactions*, Comm. Pure. Appl. Math., 46 (1993), pp. 27–56.
[86] ———, *The Hartree limit of Born's ensemble for the ground state of a bosonic atom or ion*, J. Math. Phys., 53 (2012), p. 095223.
[87] M. K.-H. Kiessling and H. Spohn, *A note on the eigenvalue density of random matrices*, Comm. Math. Phys., 199 (1999), pp. 683–695.

[88] R. Killip and M. Visan, *Nonlinear schrödinger equations at critical regularity*. Lecture notes for the summer school of Clay Mathematics Institute, 2008.
[89] J. Klauder and B. Skagerstam, *Coherent States, Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, 1985.
[90] A. Knowles and P. Pickl, *Mean-field dynamics: singular potentials and rate of convergence*, Commun. Math. Phys., 298 (2010), pp. 101–138.
[91] R. König and R. Renner, *A de Finetti representation for finite symmetric quantum states*, J. Math. Phys., 46 (2005), p. 122108.
[92] M. K. Kwong, *Uniqueness of positive solutions of* $\Delta u - u + u^p = 0$ *in* $\mathbb{R}^n$, Arch. Rational Mech. Anal., 105 (1989), pp. 243–266.
[93] J. L. Lebowitz, H. A. Rose, and E. R. Speer, *Statistical mechanics of the nonlinear Schrödinger equation*, J. Statist. Phys., 50 (1988), pp. 657–687.
[94] M. Lewin, *Geometric methods for nonlinear many-body quantum systems*, J. Funct. Anal., 260 (2011), pp. 3535–3595.
[95] M. Lewin, P. T. Nam, and N. Rougerie, *Remarks on the quantum de Finetti theorem for bosonic systems*, preprint arXiv, (2013).
[96] ———, *Derivation of Hartree's theory for generic mean-field Bose systems*, Advances in Mathematics, 254 (2014).
[97] ———, *The mean-field approximation and the non-linear Schrödinger functional for trapped Bose gases*, preprint arXiv, (2014).
[98] ———, *Derivation of nonlinear Gibbs measures from many-body quantum mechanics*, en préparation, (2014).
[99] M. Lewin, P. T. Nam, S. Serfaty, and J. P. Solovej, *Bogoliubov spectrum of interacting Bose gases*, Comm. Pure Appl. Math., in press (2013).
[100] M. Lewin and N. Rougerie. non publié, 2012.
[101] ———. non publié, 2013.
[102] E. H. Lieb, *The classical limit of quantum spin systems*, Comm. Math. Phys., 31 (1973), pp. 327–340.
[103] ———, *The stability of matter*, Rev. Mod. Phys., 48 (1976), pp. 553–569.
[104] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2001.
[105] E. H. Lieb and R. Seiringer, *Derivation of the Gross-Pitaevskii equation for rotating Bose gases*, Commun. Math. Phys., 264 (2006), pp. 505–537.
[106] ———, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, Cambridge Univ. Press, 2010.
[107] E. H. Lieb, R. Seiringer, J. P. Solovej, and J. Yngvason, *The mathematics of the Bose gas and its condensation*, Oberwolfach Seminars, Birkhäuser, 2005.
[108] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, *Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional*, Phys. Rev. A, 61 (2000), p. 043602.
[109] ———, *A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional for a two-dimensional Bose gas*, Comm. Math. Phys., 224 (2001), p. 17.
[110] ———, *Justification of c-Number Substitutions in Bosonic Hamiltonians*, Phys. Rev. Lett., 94 (2005), p. 080401.
[111] E. H. Lieb and J. P. Solovej, *Ground state energy of the one-component charged Bose gas*, Commun. Math. Phys., 217 (2001), pp. 127–163.
[112] ———, *Ground state energy of the two-component charged Bose gas.*, Commun. Math. Phys., 252 (2004), pp. 485–534.
[113] ———, *en préparation*.
[114] E. H. Lieb and W. E. Thirring, *Gravitational collapse in quantum mechanics with relativistic kinetic energy*, Ann. Physics, 155 (1984), pp. 494–512.
[115] E. H. Lieb and H.-T. Yau, *The Chandrasekhar theory of stellar collapse as the limit of quantum mechanics*, Commun. Math. Phys., 112 (1987), pp. 147–174.
[116] E. H. Lieb and J. Yngvason, *Ground state energy of the low density Bose gas*, Phys. Rev. Lett., 80 (1998), pp. 2504–2507.
[117] ———, *The ground state energy of a dilute two-dimensional Bose gas*, J. Stat. Phys., 103 (2001), p. 509.

[118] P.-L. Lions, *The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case, Part I*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, 1 (1984), pp. 109–149.
[119] ———, *The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case, Part II*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, 1 (1984), pp. 223–283.
[120] ———, *The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The limit case. I*, Rev. Mat. Iberoamericana, 1 (1985), pp. 145–201.
[121] ———, *The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The limit case. II*, Rev. Mat. Iberoamericana, 1 (1985), pp. 45–121.
[122] ———, *Mean-field games and applications*. Cours au Collège de France, Nov 2007.
[123] M. Maeda, *On the symmetry of the ground states of nonlinear Schrödinger equation with potential*, Adv. Nonlinear Stud., 10 (2010), pp. 895–925.
[124] M. Mehta, *Random matrices. Third edition*, Elsevier/Academic Press, 2004.
[125] J. Messer and H. Spohn, *Statistical mechanics of the isothermal Lane-Emden equation*, J. Statist. Phys., 29 (1982), pp. 561–578.
[126] P.-T. Nam and R. Seiringer, *Collective excitations of Bose gases in the mean-field regime*, ArXiv eprints, (2014).
[127] O. Penrose and L. Onsager, *Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium*, Phys. Rev., 104 (1956), pp. 576–584.
[128] C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation of Dilute Gases*, Cambridge University Press, 2001.
[129] D. Petz, G. A. Raggio, and A. Verbeure, *Asymptotics of Varadhan-type and the Gibbs variational principle*, Comm. Math. Phys., 121 (1989), pp. 271–282.
[130] P. Pickl, *Derivation of the time dependent Gross Pitaevskii equation with external fields*, ArXiv e-prints, (2010).
[131] ———, *Derivation of the time dependent Gross-Pitaevskii equation without positivity condition on the interaction*, J. Stat. Phys., 140 (2010), pp. 76–89.
[132] ———, *A simple derivation of mean-field limits for quantum systems*, Lett. Math. Phys., 97 (2011), pp. 151–164.
[133] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford Science Publications, Oxford, 2003.
[134] G. A. Raggio and R. F. Werner, *Quantum statistical mechanics of general mean field systems*, Helv. Phys. Acta, 62 (1989), pp. 980–1003.
[135] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York, 1978.
[136] R. Renner, *Symmetry of large physical systems implies independence of subsystems*, Nature Physics, 3 (2007), pp. 645–649.
[137] D. Robinson and D. Ruelle, *Mean entropy of states in classical statistical mechanics*, Commun. Math. Phys., 5 (1967), pp. 288–300.
[138] D. W. Robinson, *Normal and locally normal states*, Commun. Math. Phys., 19 (1970), pp. 219–234.
[139] I. Rodnianski and B. Schlein, *Quantum fluctuations and rate of convergence towards mean field dynamics*, Commun. Math. Phys., 291 (2009), pp. 31–61.
[140] N. Rougerie, *Sur la modélisation de l'interaction entre polarons et cristaux quantiques*, Séminaire Laurent Schwartz, (2012-2013).
[141] N. Rougerie and S. Serfaty, *Higher dimensional Coulomb gases and renormalized energy functionals*, ArXiv e-prints, (2013).
[142] N. Rougerie, S. Serfaty, and J. Yngvason, *Quantum hall phases and plasma analogy in rotating trapped bose gases*, J. Stat. Phys., (2013).
[143] ———, *Quantum hall states of bosons in rotating anharmonic traps*, Phys. Rev. A, 87 (2013), p. 023618.
[144] N. Rougerie and J. Yngvason, *Incompressibility estimates for the laughlin phase*. à paraître dans *Comm. Math. Phys.*, 2014.
[145] E. Sandier and S. Serfaty, *2D Coulomb Gases and the Renormalized Energy*, ArXiv e-prints, (2012).

[146] ———, *1D Log Gases and the Renormalized Energy: Crystallization at vanishing temperature*, ArXiv e-prints, (2013).
[147] R. Seiringer, *Ground state asymptotics of a dilute, rotating gas*, J. Phys. A, 36 (2003), pp. 9755–9778.
[148] ———, *The excitation spectrum for weakly interacting bosons*, Commun. Math. Phys., 306 (2011), pp. 565–578.
[149] R. Seiringer and D. Ueltschi, *Rigorous upper bound on the critical temperature of dilute Bose gases*, Phys. Rev. B, 80 (2009), p. 014502.
[150] R. Seiringer, J. Yngvason, and V. A. Zagrebnov, *Disordered Bose-Einstein condensates with interaction in one dimension*, J. Stat. Mech., 2012 (2012), p. P11007.
[151] S. Serfaty, *Coulomb gases and Ginzburg-Landau vortices*, ArXiv e-prints, (2014).
[152] I. M. Sigal, *Geometric methods in the quantum many-body problem. Non existence of very negative ions*, Commun. Math. Phys., 85 (1982), pp. 309–324.
[153] B. Simon, *The $P(\phi)_2$ Euclidean (quantum) field theory*, Princeton University Press, Princeton, N.J., 1974. Princeton Series in Physics.
[154] ———, *Geometric methods in multiparticle quantum systems*, Commun. Math. Phys., 55 (1977), pp. 259–274.
[155] ———, *Trace ideals and their applications*, vol. 35 of London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, Cambridge, 1979.
[156] ———, *The classical limit of quantum partition functions*, Comm. Math. Phys., 71 (1980), pp. 247–276.
[157] ———, *Functional integration and quantum physics*, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, second ed., 2005.
[158] A. Skorokhod, *Integration in Hilbert space*, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete, Springer-Verlag, 1974.
[159] J. P. Solovej, *Upper bounds to the ground state energies of the one- and two-component charged Bose gases*, Commun. Math. Phys., 266 (2006), pp. 797–818.
[160] ———, *Many body quantum mechanics*. LMU, 2007. Lecture notes.
[161] H. Spohn, *Kinetic equations from Hamiltonian dynamics: Markovian limits*, Rev. Modern Phys., 52 (1980), pp. 569–615.
[162] ———, *On the Vlasov hierarchy*, Math. Methods Appl. Sci., 3 (1981), pp. 445–455.
[163] ———, *Large scale dynamics of interacting particles*, Springer London, 2012.
[164] E. Størmer, *Symmetric states of infinite tensor products of C^*-algebras*, J. Functional Analysis, 3 (1969), pp. 48–68.
[165] S. J. Summers, *A Perspective on Constructive Quantum Field Theory*, ArXiv e-prints, (2012).
[166] L. Thomann and N. Tzvetkov, *Gibbs measure for the periodic derivative nonlinear Schrödinger equation*, Nonlinearity, 23 (2010), p. 2771.
[167] N. Tzvetkov, *Invariant measures for the defocusing nonlinear Schrödinger equation*, Ann. Inst. Fourier (Grenoble), 58 (2008), pp. 2543–2604.
[168] M. I. Weinstein, *Nonlinear Schrödinger equations and sharp interpolation estimates*, Comm. Math. Phys., 87 (1983), pp. 567–576.
[169] W. Zhang, D. Feng, and R. Gilmore, *Coherent states : theory and some applications*, Rev. Mod. Phys., 62 (1990), p. 867.

Université Grenoble 1 & CNRS, LPMMC, UMR 5493, BP 166, 38042 Grenoble, France.
E-mail address: nicolas.rougerie@lpmmc.cnrs.fr