Dérivation du modèle de Schrödinger Non-Linéaire dipolaire à partir du modèle à N corps

Arnaud Triay

Stage effectué à l'Université Paris-Dauphine en Avril-Juillet 2015
sous la direction de Mathieu LEWIN (CNRS & Université Paris Dauphine)

Table des matières

1 Introduction

La condensation de Bose-Einstein est un phénomène quantique se manifestant à très basse température pour un gaz de bosons très dilué. Initialement prédit par Satyendranath Bose pour des photons [3], il a été généralisé au cas des atomes par Albert Einstein en 1925. Dans cet état de la matière, toutes les particules du système occupent le même état quantique de plus basse énergie. De cette manière, le comportement global du gaz peut être prédit en résolvant un problème réduit à une seule particule, la minimisation de la fonctionnelle de Schrödinger non-linéaire. Le but de l'étude exposée dans ce mémoire est de justifier cette réduction du problème linéaire à N corps en un problème à 1 corps. La condensation ainsi prédite ne comporte initialement pas d'interaction entre particules, c'est là l'intérêt des études contemporaines sur le sujet. En effet, la condensation a aussi lieu pour des particules en interaction mais cette interaction doit être soumise à certaines hypothèses de régularité et ne doit pas être trop grande. Le potentiel d'interaction w est souvent considérée positif, radial, à support compact [41] ou bien L^1 [26], ces dernières hypothèses sont incompatibles avec un potentiel dipolaire car ce dernier anisotrope, sans signe et d'ordre $|x|^{-3}$ quand $x \to \infty$. Pour effectuer cette dérivation, on suit une méthode en deux temps exposée dans [26] qui consiste à approcher le problème à N corps tout d'abord par le modèle de Hartree via une approximation de champ moyen, puis à montrer que le modèle de Hartree est en fait proche du modèle donné par l'équation de Schrödinger non-linéaire à 1 particule. La démonstration de Lewin, Nam et Rougerie suppose $w \in L^1$, dans ce mémoire nous l'adaptons au cas dipolaire.

La première réalisation d'un condensat date de 1995 par Eric Cornell et Carl Wieman, ce qui leur valut le prix Nobel de physique en 2001. Pour cela des atomes de rubidium ont été piégés et refroidis par technique d'évaporation. Il existe plusieurs manières de piéger des particules : mise en rotation, puits de potentiel, etc. Récemment, des progrès significatifs ont été réalisés dans l'élaboration de tels condensats notamment pour les condensats dipolaires. En effet, en 2005 le premier condensat dipolaire d'atome de chrome fut réalisé expérimentalement à l'Université de Stuttgart [19]. En 2011, un condensat de dyprosium, dont les interactions dipole-dipole sont plus fortes que celles du chrome, a été réalisé à l'Université de Stanford [32].

Dans la **section 1**, le problème est tout d'abord introduit avant d'exposer le formalisme et d'annoncer les résultats souhaités. Puis la stratégie de la démonstration est dévoilée et on indique les résultats trouvés. La **section 2** est dédiée à la notion de stabilité, cruciale dans la compréhension du problème général, elle n'est néanmoins pas nécéssaire au déroulement de la démonstration. La **section 3** est entièrement dédiée à la preuve des Théorèmes 1.3 et 1.4. L'appendice en **section 4** référence des éléments de cours nécessaires ou utiles à la lecture de ce mémoire.

1.1 L'approximation de champ moyen

Ce qui suit a pour but de légitimer et d'expliquer les motivations de l'approximation de champ moyen, pour approfondissement voir [36]. Un système de N particules soumises à un potentiel confinant $V(x) \to \infty$ quand $|x| \to \infty$ et à un potentiel d'interaction entre particules w est régi par le hamiltonien suivant

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} \left(-\left(\nabla_{x_j} + iA(x_j)\right)^2 + V(x_j) \right) + \lambda \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(\ell^{-1}(x_i - x_j)). \tag{1}$$

Si ces particules sont des bosons, ce qui est le cas dans notre étude, cet opérateur H_N est défini sur $\mathfrak{H}^N := \bigotimes_s^N \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^{3N})_s$ le produit symétrique tensoriel de N copies de $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ l'espace à 1 particule de $\mathbb{R}^3$. Les paramètres λ et l sont importants car ce sont eux qui vont permettre l'approximation de champ moyen, λ représente l'intensité de la force d'interaction entre particules tandis que l caractérise plutôt la portée de ces interactions.

L'énergie d'un système décrit par une fonction d'onde $\Psi \in \mathfrak{H}^N$ est $\langle \Psi, H_N \Psi \rangle$, et l'énergie fondamentale du hamiltonien est

$$E(N) := \inf_{\|\Psi\|_2 = 1} \langle \Psi, H_N \Psi \rangle .$$

La limite de champ moyen consiste à choisir pertinemment les paramètres λ et l pour que la limite $\frac{E(N)}{N}$ quand $N \to \infty$ ne soit pas triviale, en effet les deux premiers termes dans (1) sont d'ordre N tandis que le troisième est typiquement d'ordre $\lambda N^2 l^3$ (intensité de l'interaction $\times$ nombre de particules $\times$ nombre de particules dans une boule de rayon l centrée autour d'une particule). Ceci impose à $\lambda N l^3$ d'être d'ordre 1, en posant $l = N^{-\beta}$ et $\lambda = N^{3\beta-1}$ pour un paramètre $0 \leq \beta \leq 1$, on laisse le système dans un régime de champ moyen tout en modélisant différents types d'interaction. Le régime de champ moyen a possède l'interprétation probabiliste suivante : si l'on suppose qu'un grand nombre N de particules quantiques sont identiquement distribuées de même loi ρ, alors la loi des grands nombres donne que l'interaction entre la particule j et les autres vérifie

$$\frac{1}{N-1} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}} w(x_j - x_k) \simeq \int_{\mathbb{R}^d} w(x_i - x)\rho(y)dy = w \star \rho(x_j). \tag{2}$$

Le membre de droite dans (2) est celui qui apparait dans la fonctionnelle de Hartree (4) (avec $\beta = 0$).

Par exemple [36], le cas $\beta = 0$, c'est-à-dire $\lambda = N^{-1}$ et $l = 1$ modélise des collisions fréquentes mais faibles tandis que le cas $\beta = 1$ ($\lambda = N^2$ et $l = N^{-1}$) correspond à des collisions peu fréquentes mais fortes. Sous cette contrainte, le hamiltonien H_N se réécrit

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} \Big(-\big(\nabla_{x_j} + iA(x_j)\big)^2 + V(x_j) \Big) + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} N^{3\beta} w(N^\beta(x_i - x_j)), \tag{3}$$

où l'on a choisi λ de telle sorte à faire apparaitre le facteur $1/(N-1)$ dans le but pouvoir exhiber l'énergie de Hartree lorsque l'on prend comme fonction test l'ansatz $u^{\otimes N}$, forme vers laquelle on veut montrer que les minimiseurs de l'énergie convergent, en un sens que l'on définira plus tard. Cette convergence vers ce type d'état décorrélé est ce que l'on appelle condensation.

Malheureusement, la légitimité d'un modèle tel que (1) où l'intensité λ du potentiel d'interaction varie en fonction du nombre de particules N est faible, il représenterait une situation expérimentale où de telles interactions sont reproduites artificiellement. Cependant, réalisons l'expérience de pensée suivante : les N particules se trouvent dans une boite de taille L et l'on augmente simultanément le nombre de particules et la taille de la boite en notant $E(L, N)$, l'énergie fondamentale du hamiltonien $\sum_i -\Delta + \sum_{i,j} w(x_i - x_j)$ avec condition de Dirichlet au bord de la boite, on a la relation suivante

$$\frac{E(L, N, w))}{L^2} = E(1, N, L^2 w(L\cdot)),$$

après dilatation. C'est-à-dire que le membre de droite est l'énergie fondamentale du hamiltonien

$$\sum_i -\Delta + L^2 \sum_{i,j} w(x_i - x_j).$$

Alors en posant $L = N^\beta$, si l'on veut faire coïncider ce dernier avec la forme (3), il faut pour cela que $3\beta - 1 = 2\beta$, c'est-à-dire $\beta = 1$. Ainsi, $\beta = 1$ est le seul modèle que l'on peut faire coïncider avec le modèle physique expliqué plus haut. Mais nous allons nous intéresser dans la suite au cas où β est petit.
En 2012, Mottl et ses collaborateurs [33] ont réalisé expérimentalement un gaz de particules avec interaction longue portée dont ils peuvent modifier l'interaction à souhait pour obtenir un facteur $1/(N-1)$ comme dans le modèle de champ moyen que nous étudions.

Prenons alors, $u \in L^2(\mathbb{R}^3)$, sous réserve que $u^{\otimes N}$ appartienne au domaine de la forme quadratique associée à H_N, on définit l'énergie de Hartree de u par

$$\mathcal{E}_H^N(u) := \frac{\langle u^{\otimes N}, H_N u^{\otimes N} \rangle}{N} = \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u(x)|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V(x)|u(x)|^2 + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} N^{d\beta} w(N^\beta(x-y))|u(x)|^2 |u(y)|^2 dxdy. \tag{4}$$

L'énergie fondamentale est alors définie ainsi

$$e_H^N := \inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_H(u). \tag{5}$$

Ainsi on va étudier le comportement de l'énergie de Hartree à la limite $N \to \infty$. Aussi, à partir de maintenant on notera

$$w_N(x) = N^{3\beta} w(N^\beta x). \tag{6}$$

On peut déjà remarquer que si $w \in L^1(\mathbb{R}^3)$ alors $w_N \star v \to \big(\int w\big)v$, quand $N \to \infty$, fortement dans L^p si $v \in L^p$ et de plus $\|w_N \star v\|_{L^p} \leq \|w\|_{L^1}\|v\|_{L^p}$ ([28] Théorème 2.16). Ainsi comme $H^1(\mathbb{R}^3) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^6(\mathbb{R}^3)$ (par exemple Théorème 8.8 [28]), on a pour $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$

$$\Big| \int_{\mathbb{R}^3} (w_N \star |u|^2)|u|^2 \Big| \leq \|w\|_{L^1}\|u\|_{L^4}^4 \leq C\|w\|_{L^1}\|u\|_{H^1}^4, \tag{7}$$

d'après ce qui précède et l'inégalité de Cauchy-Schwartz. Ainsi quand $w \in L^1(\mathbb{R}^3)$, l'espace des états admissibles pour l'énergie de Hartree est $\mathcal{V} = \big\{u \in H^1(\mathbb{R}^3)\,,\, \int |(\nabla + iA)u|^2 + V|u|^2 < \infty\big\}$. Par ailleurs, la remarque précédente nous invite à montrer que $\mathcal{E}_H$ tend, quand $N \to \infty$, vers l'énergie de Schrödinger Non-Linéaire définie comme suit, pour $u \in \mathcal{V}$,

$$\mathcal{E}_{nls}(u) := \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u(x)|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V(x)|u(x)|^2 + \frac{1}{2}\bigg(\int_{\mathbb{R}^3} w\bigg) \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^4 dx. \tag{8}$$

On note $e_{nls} = \inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}_{nls}(u)$. Dans [26], Lewin, Nam et Rougerie montrent la dérivation de $\mathcal{E}_{nls}$ à partir de H_N grâce à l'approximation de champ moyen pour un potentiel d'interaction $w \in L^1$ et pour β petit. On a notamment le théorème suivant.

Théorème 1.1. *[26] Soit $\beta > 0$. Supposons $V(x) > C|x|^s - C$, $V \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^3)$, $A \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^3)$, $w \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $|x|w(x) \in L^1(\mathbb{R}^3)$ avec $w(x) = w(-x)$. Si de plus w est Hartree stable, c'est-à-dire que pour tout $\rho \geq 0$ on a*

$$\iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} w(x-y)\rho(x)\rho(y)dxdy \geq 0,$$

alors pour une certaine constante $C > 0$, on a

$$e_{nls} + CN^{-\beta} \geq \frac{E(N)}{N} \geq e_{nls} - CN^{-\beta} - CN^{d\beta - \frac{1}{2+d/s+d/2}},$$

dès que $0 \leq \beta \leq \frac{1}{d(2+d/s+d/2)}$.

1.2 Cas de l'interaction dipolaire

Dans le cas que l'on étudie dans ce mémoire, le potentiel d'interaction dipole-dipole de l'ordre de $1/|x|^3$ à la limite $|x| \to \infty$ et donc l'hypothèse $w \in L^1$ n'est pas vérifiée. Le potentiel d'interaction entre deux dipoles est donné par la formule suivante :

$$K(x-y) = \frac{1 - 3\cos^2(\theta_{x,y})}{|x-y|^3}, \tag{9}$$

où $\theta_{x,y}$ est l'angle entre $x - y$ et un vecteur de référence $\vec{n}$ qui donne la direction des moments dipolaires des particules, supposés alignés. Ce potentiel est un potentiel effectif, valable à grande distance. C'est l'approximation du potentiel coulombien d'un système de deux dipoles composés chacun de deux particules de charges opposées à distance fixe l'une de l'autre. Comme rappelé plus haut, on perd l'hypothèse $w \in L^1$, mais heureusement le numérateur de (9) introduit des compensations et K définit un opérateur à noyau continu sur $L^p(\mathbb{R}^3)$ pour $1 < p < \infty$ (voir par exemple [40] Théorème 3, Section II). Et pour $u \in \mathcal{V}$, on peut définir l'énergie de Schrödinger Non-Linéaire dipolaire

$$\mathcal{E}^d_{nls}(u, \lambda_1, \lambda_2) = \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V|u|^2 + \lambda_1 \int_{\mathbb{R}^3} |u|^4 + \lambda_2 \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} (K \star |u|^2)|u|^2, \tag{10}$$

où λ_1 et λ_2 sont des paramètres réels. On définit de même $e^d_{nls}(\lambda_1,\lambda_2) = \inf_{\|u\|_{L^2}=1} \mathcal{E}^d_{nls}(u,\lambda_1,\lambda_2)$. Des études de la fonctionnelle $\mathcal{E}^d_{nls}$ ont déjà été réalisées, par exemple dans [6] (avec $A=0$, $V=|x|^2/2$) et dans [1] (avec $A=0$ et $V=0$), elles ont montré que l'existence d'un état fondamental pour $\mathcal{E}^d_{nls}$ est sensible aux valeurs relatives de λ_1 et λ_2. On a notamment le théorème suivant.

Théorème 1.2 (Carles et Hajaiej [6])**.** *On suppose que $A=0$ et $V(x)\to\infty$ quand $|x|\to\infty$ alors*
i) Si

$$\begin{cases} \lambda_2 > 0 \ \textit{et}\ \lambda_1 \ \geq \frac{4\pi}{3}\lambda_2, \\ \qquad\quad \textit{ou} \\ \lambda_2 < 0 \ \textit{et}\ \lambda_1 \ \geq -\frac{8\pi}{3}\lambda_2, \end{cases}$$

alors $\mathcal{E}^d_{nls}$ possède un unique minimiseur. Si $V(x)=V(|x|)$ alors ce minimiseur est Steiner-symétrique.
ii) Si

$$\begin{cases} \lambda_2 > 0 \ \textit{et}\ \lambda_1 \ < \frac{4\pi}{3}\lambda_2, \\ \qquad\quad \textit{ou} \\ \lambda_2 < 0 \ \textit{et}\ \lambda_1 \ < -\frac{8\pi}{3}\lambda_2, \end{cases}$$

alors $e^d_{nls}=-\infty$.

Remarque 1.1. *Pour plus d'information sur la Steiner symétrie voir par exemple [5].*

La preuve de ce théorème repose essentiellement sur le fait que l'opérateur de noyau K coïncide avec la multiplication en Fourier par une fonction $m\in L^\infty$ et que celle-ci prend ses valeurs dans l'intervalle réel $[-8\pi/3, 4\pi/3]$, alors si λ_1 est suffisamment grand (relativement au signe de λ_2) la transformée de Fourier du potentiel d'interaction total est une fonction positive, la fonctionnelle est alors minorée, et l'application des techniques habituelles permet de conclure. Pour ce qui est du point ii) du théorème, Carles et Hajaiej utilisent l'anisotropie du potentiel K ainsi que le fait qu'en dimension 3, $\widehat{K}$ est négatif sur un domaine "suffisamment grand".

Le cas étudié dans ce mémoire est plus général car on prend $A\in L^2_{\mathrm{loc}}$. Cette hypothèse supplémentaire apporte des changements dans la conclusion de ce théorème, on peut néanmoins affirmer que la stabilité est conservée (le potentiel d'interaction reste inchangé) et que la démonstration de l'existence d'un minimiseur dans ce nouveau cas est la même que celle de Carles et Hajaiej car alors $(-\nabla+iA)^2$ est à résolvante compacte. Cependant pour un potentiel A assez grand, on s'attend à l'apparition de vortex, l'invariance du problème par rotation implique la non-unicité des solutions.

1.3 Résultats principaux

On présente ici les résultats que la suite de ce mémoire a pour but de démontrer. Les hypothèses sur V, A, w sont les suivantes. On suppose que $w\in C^\infty$ est pair, borné :

$$w(x)=w(-x),\ |w(x)|\leq C, \tag{11}$$

et vérifie

$$\left|w(x-y)-\kappa\frac{1-3\cos^2(\theta_{x,y})}{|x-y|^3}\right|\leq C\frac{1}{|x-y|^{4+\epsilon}} \ \text{ pour } |x-y|\geq 1, \tag{12}$$

avec $\kappa,\epsilon,C>0$, $\theta_{x,y}=(x-y)\cdot n/|x-y|$ où $n\in\mathbb{R}^3$ est un vecteur unitaire fixé. On suppose aussi que w est classiquement stable (voir Définition 2.2), c'est-à-dire qu'il vérifie

$$\sum_{1\leq i<j\leq N} W(x_i-x_j)\geq -CN,\ \forall x_1,...,x_N\in\mathbb{R}^d, \forall N\geq 2. \tag{13}$$

w est par conséquent aussi Hartre-stable, c'est-à-dire qu'il vérifie

$$\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d}\rho(x)\rho(y)W(x-y)dxdy, \forall\rho\geq 0.$$

On notera de même w_N l'opérateur de multiplication par $w_N(x_1 - x_2)$ sur l'espace à deux particules $\mathfrak{H}^2 \simeq L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Remarque 1.2. *En fait, il suffirait que la différence (12) soit dans $L^1(|z|dz, \mathbb{R}^3)$, mais on garde la formulation plus haut pour faire écho aux hypothèses des propriétés énoncées à la section 2 sur la stabilité.*

Le potentiel V, modélisant le piège à particules, est supposé vérifier les hypothèses suivantes :

$$V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \tag{14}$$

$$V(x) \geq c|x|^s - C, \tag{15}$$

pour des constantes $s, c, C > 0$. Quant au potentiel vecteur, qui modélise un champ magnétique ou bien une force de Coriolis agissant sur des particules en rotation, il vérifie

$$A \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d). \tag{16}$$

Ces hypothèses permettent de bien définir l'opérateur de Schrödinger magnétique à 1 particule $H = -(\nabla + iA)^2 + V$, c'est un opérateur auto-adjoint dont le domaine $\mathcal{D}(H)$ est inclu dans le domaine de la forme quadratique énergie, c'est-à-dire les configurations d'énergie finie, voir 4.2.1 pour plus d'information. Pour $R > 0$, on définit le paramètre

$$a = \int_{\mathbb{R}^3} (w - \kappa K \mathbb{1}_{|x| \geq R}) dx. \tag{17}$$

Remarque 1.3. *La définition du paramètre a ne dépend pas de $R > 0$, en effet il faut se rappeler que le numérateur de (9) introduit des compensations, plus précisément pour tout $0 < R_0 < R_1$ on a*

$$\int_{R_0 < |x| < R_1} K(x) dx = 0.$$

Voir par exemple [40].

Théorème 1.3. *Soit $\beta > 0$ et $d = 3$, alors sous les hypothèses précédemment établies il existe une constante $C > 0$ telle que*

$$e^d_{nls}(a, \kappa) + CN^{-\beta} \geq \frac{E(N)}{N} \geq e^d_{nls}(a, \kappa) - CN^{-\frac{d\beta(1+2d/s+d)}{(3+2d/s+d)}} - CN^{-\beta}, \tag{18}$$

dès que $0 < \beta < \frac{1}{2d(1+d/2+d/s)}$.

Remarque 1.4. *En fait, on a plus généralement*

$$e^d_{nls}(a, \kappa) + CN^{-\beta} \geq \frac{E(N)}{N} \geq e^d_{nls}(a, \kappa) - C\frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N} - CN^{-\beta}. \tag{19}$$

où L dépend de N et est choisi de telle sorte que

$$N^{2d\beta} \ll L \ll N^{\frac{1}{(1+d/s+d/2)}}.$$

Alors en posant $L = N^\alpha$, avec $2d\beta < \alpha < 1/(1 + d/s + d/2)$, si l'on cherche à optimiser la borne (19). On trouvera que pour les valeurs de β qui nous intéressent, la borne est optimale quand les termes $N^{d\beta}L^{-1/2}$ et $L^{1+d/s+d/2}N^{-1}$ sont de même ordre, c'est-à-dire quand $\alpha = (1 + d\beta)/(3/2 + d/s + d/2)$. De (19) découle le Théorème 1.3

Remarque 1.5. *La condition sur β ainsi que la vitesse de convergence sont pires que celles du Théorème 1.1, ceci n'est pas du à la particularité dipolaire du potentiel c'est un choix de rédaction. En effet, pour des raisons de simplicité, la partie de la preuve énoncée pour l'approximation par la théorie de Hartree ne suit pas exactement celle de [26] mais leur démonstration aboutirait aussi dans le cas dipolaire.*

Remarque 1.6. *Les difficultés qui apparaissent avec le potentiel dipolaire sont en fait liées à la stabilité du système et à l'approximation de la théorie de NLS avec celle de Hartree. Dans le section suivante, nous discutons de l'existence de w vérifiant nos hypothèses.*

La convergence de l'énergie ne suffit pas d'un point de vue physique à montrer une condensation. Pour ce faire, il faut montrer que les états $|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|$ convergent, en un certain sens que l'on précisera dans la suite (ils ne vivent pas dans le même espace), vers une superposition d'états décorrélés, c'est-à-dire d'états de la forme $|u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|$. Pour représenter ce phénomène, on a le théorème suivant.

Théorème 1.4 (Convergence des états vers les minimiseurs de NLSD)**.** *On reprend les mêmes hypothèses que celle du Théorème 1.3 en supposant par ailleurs que w est classiquement stable (voir Définition 2.2), c'est-à-dire qu'il vérifie*

$$\sum_{1\leq i<j\leq N} W(x_i-x_j) \geq -CN,\ \forall x_1,...,x_N \in \mathbb{R}^d, \forall N\geq 2.$$

On note Ψ_N un état fondamental du Hamiltonien (3) et on définit ses matrices densités réduites, pour $k\in\mathbb{N}^*$, comme

$$\gamma_N^k := \mathrm{Tr}_{k+1\to N}\,|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\,.$$

Alors, modulo une sous-suite, on a

$$\lim_{N\to\infty}\gamma_N^{(n)} = \int_{u\in\mathcal{M}_{nlsd}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\,d\mu(u) \tag{20}$$

fortement dans l'espace des opérateurs à trace, pour tout $k\geq 1$, où μ est une mesure de probabilité borélienne à support dans

$$\mathcal{M}_{nlsd} = \left\{ u\in L^2(\mathbb{R}^d), \|u\|_L^2 = 1, \mathcal{E}^d_{nls}(a,\kappa,u) = e^d_{nls}(a,\kappa) \right\}. \tag{21}$$

En particulier, quand l'état fondamental u_{nlsd} de la fonctionnelle de Schrödinger Non-Linéaire est unique, on a (sans extraire une sous-suite cette fois)

$$\lim_{N\to\infty}\gamma_N^{(n)} = |u_{nlsd}^{\otimes n}\rangle\langle u_{nlsd}^{\otimes n}|\,,$$

fortement dans l'espace des opérateurs à trace.

2 De la stabilité

Cette section n'est pas nécessaire à la démonstration du résultat principal, ici on discute de l'hypothèse de stabilité (13). On introduit différentes notions de stabilité et on recherche des conditions pour qu'un potentiel de type dipolaire à longue portée soit stable. La stabilité est la propriété d'un système à ne pas "s'effondrer", peut-être cette notion est assez bien illustrée dans [27].

> Why is ordinary matter (e.g., atoms, molecules, people, planets, stars) as stable as it is ? Why is it the case, if an atom is thought to be a miniature solar system, that bringing very large numbers of atoms together (say 10^{30}) does not produce a violent explosion ? Sometimes explosions do occur, as when stars collapse to form supernovae, but normally matter is well behaved. In short, what is the peculiar mechanics of the elementary particles (electrons and nuclei) that constitute ordinary matter so that the material world can have both rich variety and stability ?

2.1 Différentes notions de stabilité

Définition 2.1. *Un système de N particules coulombiennes décrit par un Hamiltonien H_N et une énergie fondamentale $E(N) = \inf \sigma H_N$ est dit* stable du second type *[27] s'il existe une constante $C > 0$ telle que*

$$E(N) \geq -CN. \tag{22}$$

Tous les systèmes coulombiens ne sont pas stables, en 1967 Dyson [15] montre que l'énergie fondamentale de N bosons chargés décroit au moins comme $-CN^{7/5}$, vingt ans plus tard Conlon, Lieb et Yau [9] montrent la loi des $N^{7/5}$: $E(N) \geq -CN^{7/5}$. En 2004, Lieb et Solovej [30] calculent la constante C optimale. Les fermions, eux, sont stables du second type [16, 22, 31] (principe d'exclusion de Pauli). Cette notion de stabilité prend en compte l'énergie cinétique mais si on ne considère que l'énergie d'interaction, d'autres notions de stabilité peuvent émerger.

Définition 2.2. *On dit d'un potentiel W, pair, qu'il est* classiquement stable *[38] si*

$$\sum_{1 \leq i < j \leq N} W(x_i - x_j) \geq -CN, \ \forall x_1, ..., x_N \in \mathbb{R}^d, \forall N \geq 2. \tag{23}$$

En intégrant (23) contre une mesure factorisée $\rho(x_1)...\rho(x_N)$ et en prenant la limite $N \to \infty$, on trouve

Définition 2.3.

$$\iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \rho(x)\rho(y)W(x-y)dxdy, \forall \rho \geq 0. \tag{24}$$

On dira d'un potentiel pair qui vérifie (24) qu'il est Hartree-stable *[26].*

Et réciproquement quand W et localement borné, en prenant $\rho = \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$ on montre que (24) implique (23) [26], en effet on a alors

$$\sum_{1 \leq i < j \leq N} W(x_i - x_j) \geq -\frac{N}{2} W(0). \tag{25}$$

On remarquera que si un potentiel W est classiquement stable alors le système associé H_N (comme dans (1)) est stable du second type. Cependant, dans notre démarche d'approximation du système à N particules par la théorie de Hartree, le potentiel apparaissant dans le hamiltonien H_N dans (3) et dans la fonctionnelle de Hartree $\mathcal{E}_H$ (4) dépend de N, en effet on a pris $w_N(x) = N^{d\beta} w(N^\beta x)$, par ailleurs, étant dans le cadre d'une limite de champ moyen, un facteur $1/(N-1)$ est devant le terme de potentiel d'interaction. La question de la stabilité se pose, autant dans le cas de H_N et de $\mathcal{E}_H$. Pour la fonctionnelle de Hartree, en dimension $d \geq 3$, on remarque que si $u \in L^2(\mathbb{R}^3)$ ne vérifie pas (24), alors en prenant $u_N(x) = N^{d\beta/2} u(N^\beta x)$ on a $e_H \to -\infty$ quand $N \to \infty$. Et comme $e_H \geq E(N)/N$, le système à N particules n'est pas stable du second type.

Dans la limite de champ moyen que nous nous proposons d'étudier, $w_N(x) = N^{d\beta} w(N^\beta x)/(N-1)$, la stabilité classique de w n'implique pas toujours de manière évidente la stabilité du second type de H_N, en effet, si w est classiquement stable, le terme d'interaction se minore par

$$\frac{1}{N-1} \sum_{1 \leq i < j \leq N} N^{d\beta} w(N^\beta (x_i - x_j)) \geq -CN^{d\beta},$$

un quand $\beta \leq 1/d$, le système est stable du second type mais quand $\beta > 1/d$, on ne sait pas, il faut prendre en compte le potentiel à 1 particule et l'énergie cinétique. Dans le présent mémoire, la dimension 3 est principalement étudiée et les conditions trouvées sur β, qui ne sont certainement pas optimales, imposent nécessairement $0 < \beta \leq 1/3$. Dans l'éventualité où $\beta > 1/3$, alors il faut tenir compte de l'énergie cinétique pour montrer que, éventuellement, le système est stable du second type. Mais il se trouve que si (23) n'est pas vérifiée alors d'après [38] l'inégalité (22) n'est en général pas vérifiée non plus. Dans [41] et [29], la dérivation pour $0 < \beta \leq 1$ a lieu avec l'hypothèse $w \geq 0$ afin que (23) soit vérifiée systématiquement et que le système soit stable du second type. Du fait de la nature dipolaire du potentiel, nous ne jouissons pas de cette hypothèse.

2.2 Potentiels classiquement stables

L'intérêt initial porté sur les potentiels classiquement stables, c'est-à-dire vérifiant (23), provient de la physique statistique. En effet, considérons, en système grand canonique, des particules dans un domaine $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ soumises à un potentiel total $U(x_1, ..., x_N)$, alors la *fonction de partition grand canonique* associée est [38]

$$\Xi_\lambda = 1 + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \int_{\Lambda^N} dx_1 ... dx_N \exp\big[- \beta U(x_1, ..., x_N)\big],$$

où β est la température inverse du système et $z > 0$. La stabilité classique ($U(x_1, ..., x_N) \geq -CN$) entraine, par majoration terme à terme, la convergence de la fonction de partition grand canonique. La réciproque pour les potentiels d'interaction entre paires de particules $U(x_1, ..., x_N) = \sum_{i<j} W(x_i - x_j)$ est donnée dans [38] Proposition 3.2.2.

Dans [17], on trouve quelques exemples de potentiels d'interaction de paires classiquement stables : potentiels à noyau dur, potentiels positif plus type positif, potentiel *power law*. Notre intérêt portera sur ces deux derniers.

Définition 2.4 (Positif plus type positif)**.** $W(|x|) \geq W_+(|x|) = \int dp e^{ip\cdot x} \widehat{W_+}(p)$ *où* W_+ *est intégrable et* $\widehat{W_+} \geq 0$. W_+ *est dit de* type positif.

La preuve que ce type de potentiel est classiquement stable est originalement due à Ruelle [37] qui prouva en fait un résultat plus fort que la stabilité avec l'hypothèse supplémentaire $\widehat{W}(0) > 0$.

Lemme 2.1. *Soit W de type positif alors W est classiquement stable.*

Démonstration. En effet, écrivons $W(x) = \int dp e^{ip\cdot x} \widehat{W}(p)$. Remarquons d'abord, en prenant $x = 0$, que $\widehat{W} \geq 0$ est intégrable et donc W est nécessairement continue et bornée. Prenons alors la densité $n = \sum_i \delta_{x_i}$, on a

$$\frac{1}{2} \int \widehat{W}(p) |\widehat{n}|^2(p) dp = \frac{1}{2} \int (W \star n) n = \sum_{i<j} W(x_i - x_j) + \frac{N}{2} W(0) \geq 0. \tag{26}$$

□

Remarque 2.1. *Les potentiels de type positif sont en fait mieux que simplement stable, ils sont stables pour des configurations de charges quelconques, en reprenant la démonstration plus haut on peut aisément montrer que*

$$\sum_{i<j} e_i e_j W(x_i - x_j) \geq 0, \, \forall e_i \in \mathbb{R}. \tag{27}$$

On l'utilisera d'ailleurs plus loin.

Le second type de potentiel qui nous intéresse est le type *power law.*

Théorème 2.1 (Power law)**.** *Un potentiel de type power law, c'est-à-dire un potentiel qui vérifie*

- $W(r) \geq D_1 / r^{d+\epsilon_1}$ *au voisinage de* 0
- $W(r) \geq -D_0$
- $W(r) \geq -D_2 / r^{d+\epsilon_2}$ *au voisinage de* ∞,

pour des constantes $D_0, D_1, D_2, \epsilon_1, \epsilon_2 > 0$, *est classiquement stable.*

La difficulté provient du fait qu'un potentiel $\sim -1/|x|^3$ quand $|x| \to \infty$ est instable, il suffit d'agence les particules sur un réseau cubique pour avoir une énergie de l'ordre de $-N \log N$. Sous les hypothèses du Théorème 2.1, la divergence en 0 est suffisamment grande pour rendre de le système stable. La preuve de se résultat est initialement due à Fisher [17] et Dobrushin [13] (ce dernier montre en fait un résultat légèrement plus général sur les bornes dans la définition de potentiel power law). En dimension 3, l'idée principale de la preuve de *Fisher* est de minorer le potentiel power law en utilisant des potentiels de Morse $W(r) = W_1 e^{-r/c_1} - W_2 e^{-r/c_2}$ qui, sous la condition $W_1 c_1^3 > W_2 c_2^3$ sont de type positif. Une esquisse de la preuve peut aussi être trouvée dans [38] Proposition 3.2.8. C'est cette idée que l'on suivra dans la prochaine sous-section pour trouver des conditions sur le potentiel dipolaire à longue portée pour qu'il soit classiquement stable. Au lieu d'utiliser le potentiel de Morse, on utilisera un des potentiels de Yukawa $(e^{-\mu r} - e^{-\nu r})/r$.

2.3 Stabilité du potentiel d'interaction dipole-dipole

Dans cette section, on se propose d'exhiber une classe de potentiels dipolaires à longue portée stables, c'est-à-dire qui vérifient (23) et (24). L'énergie d'interaction dipole-dipole entre deux particules X_i, X_j est donnée par la fonction

$$K(X_i - X_j) = \frac{1 - 3\cos^2(\theta)}{|x|^3} \tag{28}$$

avec $\cos(\theta) = (X_i - X_j) \cdot \vec{n} / \|X_i - X_j\|$ où $\vec{n}$ est un vecteur de référence fixe qui donne la direction des moments dipolaires, supposés alignés, des particules. La formule (28) provient de l'approximation d'un potentiel coulombien généré par un certain système de particules lorsque les dipôles sont "loin" les uns des autres. Nous allons faire bon usage de cette origine en décomposant le potentiel d'interaction en une partie longue portée du potentiel coulombien qui, elle, est stable [18], plus une erreur qui sera stabilisée par la partie courte portée du potentiel d'interaction total (Lemme 2.2).

Lemme 2.2 (Stabilisation par le potentiel à courte portée)**.** *Soient $w_0 \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3)$, $w_0 > \eta > 0$ et $w_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $|w_1(x)| \le C_0 1/|x|^{3+\epsilon_0}$ pour tout $|x| \ge 1$, où $\eta, \epsilon_0, C_0 > 0$. Définissons pour $R > 1$*

$$\phi_R = w_0 \mathbb{1}_{|x| \le R} + w_1 \mathbb{1}_{|x| \ge R}.$$

Alors, il existe une constante universelle C_{univ}, donnée par (31), telle que si

$$R_0^{\epsilon_0/2} \eta \ge C_0 C_{univ}, \tag{29}$$

il existe $\psi \in L^1(\mathbb{R}^3)$ tel que $\psi \le \phi_{R_0}$, $\widehat{\psi} \ge 0$ et $\int \widehat{\psi} < \infty$. En particulier, ϕ_{R_0} est minorée par une fonction de type positif, c'est donc un potentiel stable.

Démonstration. La stratégie de la preuve est de relever la fonction ϕ_R, en lui ajoutant une fonction ψ_1 dont on contrôle la transformée de Fourier, pour que la somme $\phi_R + \psi_1$ soit positive. On cherchera alors des conditions sur R, η et C_0 pour pouvoir minorer cette somme par une fonction de type positif ψ_μ.
Soit $\epsilon = \epsilon_0/2$, on a

$$w_1(x)\mathbb{1}_{|x| \ge R}(x) \le \frac{2C_0}{|x'|^{3+\epsilon}} \mathbb{1}_{|x| \ge R-1}(x') \text{ pour tout } |x - x'| \le 1.$$

On pose $\psi_1 = \frac{C}{|x|^{3+\epsilon}} \mathbb{1}_{|x| \ge R-1} \star \alpha$ avec α une fonction $\mathcal{C}^\infty$ à support dans $B(0, \frac{1}{2})$ et telle que $\alpha \ge 0$ et $\int \alpha = 1$. Alors $|w_1(x)| \le \psi_1(x)$ et comme α est $\mathcal{C}^\infty$, $\widehat{\alpha}$ est à décroissance rapide, on a l'inégalité suivante

$$\widehat{\psi_1}(p) \le \frac{C_0 |\mathbb{B}| \|(1-\Delta)^3 \alpha\|_\infty \|\mathbb{1}_{|x| \ge R} 1/|x|^{3+\epsilon}\|_{L^1}}{4(1+p^2)^3} =: \frac{C_1}{(1+p^2)^3}.$$

On remarque que $C_1 = C_1(R) = C^1_{univ} \frac{1}{R_0^\epsilon} = \mathcal{O}(\|\mathbb{1}_{|x| \ge R} 1/|x|^{3+\epsilon}\|_{L^1})$. Par ailleurs, compte tenu des hypothèses sur α, on a aussi

$$\frac{(2/3)^4}{|x|^{3+\epsilon}} \le \psi_1(x) \text{ pour } |x| \ge R - 1.$$

Définissons alors, pour $\mu > 0$,

$$\psi^\mu(x) = \mu \frac{e^{-|x|} - e^{-2|x|}}{|x|}.$$

Pour $\mu := (\frac{2}{3})^4 \frac{\eta}{2}$, on a

$$\psi^\mu \le \phi_R + \psi_1 \tag{30}$$

et

$$\widehat{\psi^\mu}(p) = \mu\Big(\frac{1}{|p|^2+1} - \frac{1}{|p|^2+2}\Big) = \frac{\mu}{(|p|^2+1)(|p|^2+2)} \geq \frac{(2/3)^4\eta}{4}\frac{1}{(1+|p|^2)^3} := \frac{C_2}{(1+|p|^2)^3}.$$

Prenons alors $R_0 \geq 1$ tel que $C_1(R_0) < C_2$, alors $\psi := \psi^\mu + \psi_1 \leq \phi_{R_0}$ est tel que

$$\widehat{\psi} \geq \frac{C_2 - C_1}{(1+|p|^2)^3} \geq 0.$$

De plus, la condition $C_1(R_0) < C_2$ peut se réécrire

$$R_0^\epsilon \eta \geq C_0 (3/2)^4 |\mathbb{B}||\mathbb{S}|\|(1-\Delta)^3\alpha\|_\infty, \tag{31}$$

ce qui donne la borne annoncée dans le lemme. □

Remarque 2.2. *Une question légitime à laquelle nous n'avons pas encore de réponse est de savoir si l'on peut avec le Lemme 2.2 atteindre tout couple (a,κ) défini en (12) et (17) vérifiant les hypothèses du Théorème 1.2. Pour cela on peut commencer par chercher à optimiser la constante C_{univ}.*

Approximation du potentiel dipole-dipole par un potentiel coulombien

Proposition 2.1. *Soit w vérifiant (11) et (12), alors quitte à lui rajouter un potentiel courte portée $w_0 \geq \eta \mathbb{1}_{|x|>R_0}$ avec η et R_0 assez grands, c'est-à-dire de telle sorte que le nouveau potentiel vérifie les hypothèses du Lemme 2.2, alors $w + w_0$ est classiquement stable.*

L'idée est de comparer le potentiel w qui est lisse à courte portée et dipolaire à longue portée avec le potentiel de Coulomb, malheureusement ce dernier n'est pas stable, on le comparera alors plutôt avec sa différence avec le potentiel Yukawa $(1-e^{-r})/r$ qui est comme le potentiel de Coulomb au voisinage de $+\infty$ mais meilleur en 0. Soient $2N$ particules, telles que $X_1, ..., X_N$ soient chargées positivement de charge 1 et $X_{N+1}, ..., X_{2N}$ soient chargées de charge -1. Supposons que pout tout $1 \leq i \leq N$, les particules X_i et X_{N+i} soient telles que $X_{N+i} - X_i = \delta\vec{n}$, où $\delta > 0$ est une longueur fixée, indépendante de i. Soient alors $1 \leq i < j \leq N$, le potentiel d'interaction du système composé des particules $X_i, X_{N+i}, X_j, X_{N+j}$ est donné par

$$C(X_i - X_j) := \frac{1}{|X_i - X_j|} + \frac{1}{|X_{N+i} - X_{N+j}|} - \frac{1}{|X_i - X_{N+j}|} - \frac{1}{|X_{N+i} - X_j|} - 2\frac{1}{\delta}.$$

On a $X_{N+i} = X_i + \delta\vec{n}$ et $X_{N+j} = X_j + \delta\vec{n}$, notons $X_i - X_j = \vec{r}$ et $|\vec{r}| = r$, alors

$$|X_i - X_j|^{-1} = |X_{N+i} - X_{N+j}|^{-1} = r^{-1}$$

et

$$|X_i - X_{N+j}|^{-1} = |\vec{r} - \delta\vec{n}|^{-1}\ ,\ |X_{N+i} - X_j|^{-1} = |\vec{r} + \delta\vec{n}|^{-1}.$$

On a le lemme suivant.

Lemme 2.3 ([23], Développement dipolaire)**.** *Il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $R, h \in \mathbb{R}^3$ avec $R + h \neq 0$,*

$$\left|\frac{1}{|R+h|} - \left(\frac{1}{|R|} - \frac{e_r \cdot h}{|R|^2} + \frac{3(e_r\cdot h)^2 - |h|^2)}{2|R|^3}\right)\right| \leq \frac{C|h|^3}{|R|^3|R+h|}$$

avec $e_r = R/|R|$.

Notons

$$\tilde{C}(X_i - X_j) := C(X_i - X_j) + \frac{2}{\delta},$$

l'interaction totale des deux dipoles sans l'interaction intradipole. En utilisant le lemme précédent, on peut montrer que pour $\frac{\delta}{r} < \frac{1}{4}$ on a

$$\tilde{C}(X_i - X_j) = \delta^2 K(X_i - X_j) + \mathcal{O}(\frac{\delta^3}{r^4}). \tag{32}$$

Réécrivons l'énergie d'interaction dipolaire du problème à N particules :

$$\frac{1}{N-1}\sum_{i<j} \mathbb{1}_{|X_i - X_j| \geq \frac{R}{N^\beta}} K(X_i - X_j) = \frac{1}{N-1}\sum_{i<j} \mathbb{1}_{|X_i - X_j| \geq \frac{R}{N^\beta}} \Big(K(X_i - X_j) - \delta^{-2}\tilde{C}(X_i - X_j)\Big) \tag{33}$$

$$+ \frac{1}{N-1}\sum_{i<j} \mathbb{1}_{|X_i - X_j| \geq \frac{R}{N^\beta}} \delta^{-2}\tilde{C}(X_i - X_j) - \delta^{-2} G(X_i - X_j) \tag{34}$$

$$+ \frac{1}{N-1}\sum_{i<j} \delta^{-2} G(X_i - X_j) \tag{35}$$

où

$$G(X_i - X_j) = 2\frac{1 - e^{-\mu|X_i - X_j|}}{|X_i - X_j|} - \frac{1 - e^{-\mu|X_i - X_j + \delta\vec{n}|}}{|X_i - X_j + \delta\vec{n}|} - \frac{1 - e^{-\mu|X_i - X_j - \delta\vec{n}|}}{|X_i - X_j - \delta\vec{n}|}.$$

Le terme (35) représente l'énergie coulombienne d'interaction longue portée, tandis que (33) et (34) sont à considérer comme des termes d'erreur. Il faut penser δ et μ comme des paramètres de champ moyen, une analyse dimensionnelle donne $\mu \sim N^\beta$, $\delta \sim N^{-\beta}$. La condition d'approximation $\frac{\delta}{r} < \frac{1}{4}$ se transmet sur R, il faut choisir R assez grand, $R \geq 4$ convient pour l'instant. L'énergie d'interaction dipolaire se réécrit alors

$$\frac{1}{N-1}\sum_{i<j} N^{3\beta} w_1(N^\beta(X_i - X_j)) + N^{3\beta} w_2(N^\beta(X_i - X_j)) + N^{3\beta} w_3(N^\beta(X_i - X_j)),$$

avec $w_1(x) = \mathbb{1}_{|x| \geq R}\Big(K(x) - \tilde{C}_1(x)\Big)$, $w_2(x) = \mathbb{1}_{|x|\geq R}\tilde{C}_1(x) - G_\alpha(x)$ et $w_3(x) = G_\alpha(x)$, G_α est G où l'on a pris $\mu = \alpha$, un paramètre qui nous sera utile, $\tilde{C}_1$ est $\tilde{C}$ où l'on a pris $\delta = 1$.

Montrons que les deux premiers termes, w_1 et w_2, sont stabilisés par un potentiel $w_0 \mathbb{1}_{|x| \leq R}$ avec w_0 satisfaisant les hypothèses du Lemme (2.2). Il suffit pour cela de vérifier que ces potentiels vérifient aussi les hypothèses du Lemme. La condition $R \geq 4$ assure que $w_1(x) = \mathcal{O}(\frac{1}{|x|^4})$ pour $|X| > R$. Pour w_2, on a $|w_2(x)| \leq R^{-1}\mathbb{1}_{|x|\geq R} e^{-\alpha|x|} + 4\mathbb{1}_{|x|\leq R}\alpha$. Le premier terme est clairement un $\mathcal{O}(\frac{1}{|x|^4})$ et le second est majoré en module par 4α. En choisissant α assez petit, par exemple de telle sorte que $4\alpha < \eta/2$ (η étant le minorant de w_0, cf Lemme 2.2), cette partie du potentiel peut être assimilée au potentiel courte portée, de telle sorte que le nouveau potentiel $\tilde{w}_0 := w_0 + \mathbb{1}_{|x|\leq R} w_2$ vérifie toujours les hypothèses du Lemme mais pour η remplacé par $\eta/2$.

Le troisième potentiel est stable car de type positif, en effet étant donné un système de particules $Y_1, ..., Y_k$ de charges $e_1, ..., e_k$, en notant $p = \sum e_i \delta_{Y_i}$, on a

$$\begin{aligned} 2\sum_{i<j} e_j \frac{1 - e^{-\alpha|Y_i - Y_j|}}{|Y_i - Y_j|} &= \iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dp(x)dp(y) - \sum_{i=1}^N e_i^2 \alpha \\ &\geq \iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\alpha^2}{(|u|^2 + \alpha^2)|u|^2} |\widehat{p}(u)|^2 du - N\max\{e_i\}^2\alpha \geq -CN. \end{aligned}$$

Ceci vaut en particulier pour $Y_0 = 0, Y_1 = \vec{n}, Y_2 = x, Y_3 = x + \vec{n}$ et $|e_i| = 1$, ce qui prouve la stabilité de w_3.

3 Démonstration des résultats

3.1 Approximation de champ moyen

Dans cette section on montre que l'énergie moyenne du modèle à N corps est très proche vers celle du modèle de champ moyen. On rappelle que le hamiltonien du problème à N corps est le suivant

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} \Big(-\big(\nabla_{x_j} + iA(x_j)\big)^2 + V(x_j) \Big) + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \le i < j \le N} N^{d\beta} w(N^\beta (x_i - x_j)).$$

En notant Ψ_N l'état fondamental du système, l'énergie moyenne s'écrit

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{1}{N} \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle = \frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \Big[H_2 \gamma_N^{(2)} \Big],$$

où $\gamma_N = |\Psi_N\rangle \langle \Psi_N|$ est la matrice densité à N particules, $\gamma_N^{(k)} = \operatorname{Tr}_{k+1 \to N} \gamma_N$ est la matrice densité réduite à k particules et w est le potentiel d'interaction particule-particule.

L'énergie de Hartree (dépendante de N), quant à elle, s'écrit pour $u \in \mathcal{V}$,

$$\mathcal{E}_H(u) = \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u(x)|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V(x)|u(x)|^2 + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} N^{d\beta} w(N^\beta (x-y))|u(x)|^2 |u(y)|^2 dxdy, \quad (36)$$

où $\mathcal{V} = \Big\{ u \in H^1(\mathbb{R}^3) \,,\, \int |(\nabla + iA)u|^2 + V|u|^2 < \infty \Big\}$ est l'espace des états accessibles d'un système sans interaction particule-particule. Le terme d'interaction entre particules (le troisième dans (48)) est fini puisque l'on a supposé que le potentiel w rendait l'énergie stable du second type, et donc par conséquent finie à N fixé.

Théorème 3.1. *On a*

$$\left| \frac{E(N)}{N} - e_H^N \right| \longrightarrow 0 \text{ quand } N \to \infty,$$

plus précisément, pour une certaine constante $C > 0$, pour N assez grand, on a

$$e_H^N \ge \frac{E(N)}{N} \ge e_H^N - C \frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}} - C \frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C \frac{N^{d\beta} L}{N}. \quad (37)$$

dès que $0 < \beta < \frac{1}{2d(1+d/2+d/s)}$, où L dépendant de N est choisi de telle sorte que

$$N^{2d\beta} \ll L \ll N^{\frac{1}{(1+d/s+d/2)}}.$$

On a évidement $e_H N \ge \frac{E(N)}{N}$ car en prenant la fonction test $\Psi_N = u^{\otimes N}$ on obtient $\langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle = N e_H$. La suite est consacrée à prouver la deuxième partie de l'inégalité (37) et par conséquent que

$$\liminf \frac{E(N)}{N} \ge \limsup e_N. \quad (38)$$

La preuve suit celle de [26], l'idée est d'utiliser le Théorème de Definetti quantique quantitatif pour approcher $\gamma_N^{(2)}$ par une combinaison convexe d'état décorrélés, c'est-à-dire de la forme $u^{\otimes N}$. Ce dernier théorème, qui donne une majoration explicite de l'erreur, n'est valable que sur un espace de dimension finie. À cette fin on réduit le problème à l'espace engendré par le bas-spectre de H_1, le hamiltonien à 1 particule, tout en maitrisant l'erreur ainsi commise en utilisant que l'énergie totale reste bornée. Plus précisément, on essaye d'abord de maîtriser l'erreur commise en remplaçant l'état fondamental γ_N par le localisé sur le bas-spectre $P_-^{\otimes N} \gamma_N P_-^{\otimes N}$ où $P_- = \mathbb{1}_{]-\infty, L]}\big(H_1\big)$ est le projecteur spectral sous le niveau d'énergie L. Puis, on remplace $P_-^{\otimes N} \gamma_N P_-^{\otimes N}$ par une combinaison à coefficients positifs $\int_{SP_- \mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle \langle u^{\otimes N}| \, d\mu_N(u)$ tout en contrôlant l'erreur. Rappelons maintenant que

$$\frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \Big[H_2 \gamma_N^{(2)} \Big] = \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}} \Big[H_1 \gamma_N^{(1)} \Big] + \frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2} \Big[N^{d\beta} w(x-y) \gamma_N^{(2)} \Big].$$

3.1.1 Localisation à basse énergie

Minoration de l'énergie à 1 particule

Cette partie de l'énergie est constituée de l'énergie cinétique comprenant un potentiel magnétique ou une force de Coriolis $\int |(\nabla + iA)u|^2$ et du terme de potentiel confinant $\int V|u|^2$. Quitte à rajouter une constante à V, on peut supposer que $V \geq 0$, et alors le spectre de l'opérateur $H_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_1$ est inclu dans $\mathbb{R}_+^*$. On rappelle que la résolvante de cet opérateur est compacte, on note alors $(\lambda_k)_k$ la suite croissante de ses valeurs propres avec ordre de multiplicité et on fixe $(e_k)_k$ une base hilbertienne de vecteurs propres associés. On a

$$\begin{aligned}
\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[H_1\gamma_N^{(1)}\right] &= \sum_{k\geq 0}\lambda_k \langle e_k, \gamma_N^{(1)} e_k\rangle \\
&\geq \sum_{k_0\geq k\geq 0}\lambda_k \langle e_k, \gamma_N^{(1)} e_k\rangle + L\sum_{k\geq k_0+1}\langle e_k, \gamma_N^{(1)} e_k\rangle \\
&= \operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[H_1 P_-\gamma_N^{(1)}P_-\right] + L\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}}\left[P_+\gamma_N^{(1)}\right] \\
&= \frac{1}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[\left(H_1\otimes\mathbb{1}+\mathbb{1}\otimes H_1\right)P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2}\right] + \frac{L}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[P_+\gamma_N^{(2)}\right].
\end{aligned} \tag{39}$$

Le lecteur remarquera que la minoration par le premier terme dans (39) suffit à minorer l'énergie à 1 particule par celle du localisé sur le bas spectre mais le second terme est conservé car il sera utile par la suite.

Minoration de l'énergie d'interaction (2 particules)

Pour un potentiel d'interaction borné w, l'erreur due à la localisation à basse énergie dans le hamiltonien H_N est la suivante

$$\begin{aligned}
&\operatorname{Tr}\left[w_N(\gamma_N^{(2)} - P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2})\right] = \operatorname{Tr}\left[(w_N - P_-^{\otimes 2}w_N P_-^{\otimes 2})\gamma_N^{(2)}\right] \\
&= \operatorname{Tr}\left[\tilde{H_1}^{-1/2}(w_N - P_-^{\otimes 2}w_N P_-^{\otimes 2})\tilde{H_1}^{-1/2}\tilde{H_1}^{1/2}\gamma_N^{(2)}\tilde{H_1}^{1/2}\right]
\end{aligned}$$

où on a noté $\tilde{H_1} = H_1\otimes\mathbb{1}+\mathbb{1}\otimes H_1$.

Lemme 3.1. *On a* $\|\tilde{H_1}^{-1/2}\big(w_N - P_-^{\otimes 2}w_N P_-^{\otimes 2}\big)\tilde{H_1}^{-1/2}\| \leq CN^{3\beta}L^{-1/2}$.

Démonstration. En effet, utilisons la caractérisation pour les opérateurs autoadjoints $\|A\| = |\sup_{\|u\|=1}\langle u, Au\rangle|$ et décomposons $u\in\mathfrak{H}^{\otimes 2}$ en $u = u_- + u_+$ avec $u_+\in\ker(P_-^{\otimes 2})$ et $u_-\in\ker(P_-^{\otimes 2} - \mathrm{Id}_{\mathfrak{H}^{\otimes 2}})$. Alors on a

$$\begin{aligned}
&\langle u_- + u_+, \tilde{H_1}^{-1/2}(w_N - P_-^{\otimes 2}w_N P_-^{\otimes 2})\tilde{H_1}^{-1/2}(u_- + u_+)\rangle \\
&= \langle u_- + u_+, \tilde{H_1}^{-1/2}w_N\tilde{H_1}^{-1/2}(u_- + u_+)\rangle - \langle u_-, \tilde{H_1}^{-1/2}w_N\tilde{H_1}^{-1/2}u_-\rangle \\
&= \langle u_+, \tilde{H_1}^{-1/2}w_N\tilde{H_1}^{-1/2}u_+\rangle + 2\langle u_-, \tilde{H_1}^{-1/2}w_N\tilde{H_1}^{-1/2}u_+\rangle,
\end{aligned}$$

mais $\|\tilde{H_1}^{-1/2}u_+\| \leq \|u\|L^{-1/2}$ d'où $|\langle u, \tilde{H_1}^{-1/2}(w_N - P_-^{\otimes 2}w_N P_-^{\otimes 2})\tilde{H_1}^{-1/2}u\rangle| \leq CN^{3\beta}L^{-1/2}\|u\|^2$, en utilisant que w est borné et donc que $w_N \leq CN^{3\beta}$

□

Par ailleurs $\operatorname{Tr}\left|\tilde{H_1}^{1/2}\gamma_N^{(2)}\tilde{H_1}^{1/2}\right| = \operatorname{Tr}\tilde{H_1}\gamma_N^{(2)} \leq C$ uniformément en N puisque l'énergie est bornée. Ainsi on a

$$\operatorname{Tr}\left[w_N\gamma_N^{(2)}\right] \geq \operatorname{Tr}\left[w_N P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2}\right] - CN^{d\beta}L^{-1/2}. \tag{40}$$

3.1.2 Condensation pour les états localisés

Après avoir réduit notre problème de minoration à un sous-espace de dimension fini $\ker(P_-^{\otimes 2}) \subset \mathfrak{H}^2$, on utilise le lemme suivant pour relier l'énergie de H_N à l'énergie de Hartree.

Lemme 3.2 (Théorème de De Finetti quantique quantitatif pour état localisé)**.** *Soit γ_N un état à N corps et $L > 0$, alors il existe une mesure positive sur $SP_-\mathfrak{H}$ notée μ_N telle que*

$$\operatorname{Tr}\left| P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\, d\mu_N(u)\right| \leq \frac{8N_L}{N}.$$

De plus $1 \geq \mu_N(SP_-\mathfrak{H}) \geq \frac{N\lambda^2-\lambda}{N-1}$ où $\lambda = \operatorname{Tr} P_-\gamma_N^{(1)}$ et $N_L = \dim(P_-\mathfrak{H})$.

Ce théorème est une concaténation du Théorème de Definetti quantitatif de [7] et d'une discussion de [26, Lemme 3.4]. Pour compléter l'estimation de l'erreur on a aussi le lemme suivant.

Lemme 3.3 (Dimension de l'espace des états de basse énergie)**.** *Soit V et A comme précédemment. Alors pour L assez grand on a*

$$N_L \leq CL^{d/s+d/2}. \tag{41}$$

Démonstration. Il suffit de considérer l'opérateur auto-adjoint $G_L := \big((-i\Delta + A)^2 + V - L\big)L^{-1}$. On a alors

$$N_L \leq \operatorname{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^d)}\left[\exp G_L\right] \leq \frac{1}{(2\pi)^d}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \exp\left(\frac{-p^2+V(x)-L}{L}\right)dxdp \tag{42}$$

d'après [8] Théorème 2.1. On conclut en remarquant que par hypothèse $V(x) \geq C|x|^s - C$. □

Condensation pour l'énergie à 1 particule

L'erreur commise en remplaçant l'état localisé (premier terme dans (39)) par la superposition d'états décorrélés donné par le Lemme 3.2 est

$$\left|\operatorname{Tr}\tilde{H}_1\left(P_-^{\otimes N}\gamma_N P_-^{\otimes N} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes N}\rangle\langle u^{\otimes N}|\, d\mu_N(u)\right)\right| \leq CL\frac{N_L}{N} \leq C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N}, \tag{43}$$

en utilisant les Lemmes 3.2 et 3.3.

Condensation pour l'énergie d'interaction (2 particules)

On s'applique maintenant à estimer l'erreur commise sur le terme d'interaction. On a

$$\left|\operatorname{Tr} w_N P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2} - \int_{SP_-\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\, d\mu_N(u)\right| \leq C\frac{N^{d\beta}L}{N}, \tag{44}$$

grâce aux Lemmes 3.2 et 3.3.

Conclusion

En rassemblant les inégalités de localisation (39), (40) ainsi que les inégalités de structures (43), (44) (obtenues par le théorème de De Finetti) on obtient

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[H_2\gamma_N^{(2)}\right]\\
\geq&\frac{1}{2}\int_{SP_-\mathfrak{H}}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[H_2|u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\right]d\mu_N + \frac{L}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[P_+\gamma_N^{(2)}\right] - CN^{d\beta}L^{-1/2} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N}\\
\geq& e_H\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) + \frac{L}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[P_+\gamma_N^{(2)}\right] + \int_{SP_-\mathfrak{H}}(\mathcal{E}_H(u)-e_H)d\mu_N(u) - CN^{d\beta}L^{-1/2} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N}.
\end{aligned} \tag{45}$$

On cherche maintenant des conditions sur L et β pour prouver (38). Remarquons d'abord que dans (45), le troisième terme est positif par définition de e_H, on le minore par 0. Ensuite, pour que les derniers termes disparaissent à la limite, il faut et il suffit que

$$N^{2d\beta} \ll L \ll N^{\min(1-d\beta, \frac{1}{(1+d/s+d/2)})},$$

ce qui est possible si et seulement si $\beta < \min(1/(3d), 1/(2d(1+d/2+d/s)))$. Examinons alors le premier terme, si $e_H < 0$ alors d'après le Lemme 3.2, on a $\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) \leq 1$, ce qui conclut. Sinon, $e_H \geq 0$ et il faut montrer que $\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) \to 1$, c'est là que le second terme dans (39) devient utile, il permet de contrôler la fraction des particules localisées dans les hautes énergies. Il indique qu'une concentration des particules dans les basses énergies de H_1 est favorable à une minimisation de l'énergie totale, en effet

$$e_H^N \mu_N(SP_-\mathfrak{H}) + \frac{L}{2}\operatorname{Tr}_{\mathfrak{H}^2}\left[P_+\gamma_N^{(2)}\right] \geq \frac{N\lambda^2 - \lambda}{N-1} e_H^N + \frac{L}{2}(1-\lambda) \geq e_H^N,$$

la dernière inégalité est obtenue par optimisation par rapport à λ, étant donné que $L \gg CN^{\beta d} \geq e_H^N$. De plus, pour que l'énergie totale reste bornée, il faut que $|1-\lambda| \leq CL^{-1}$, d'où

$$\mu_N(SP_-\mathfrak{H}) = 1 + \mathcal{O}(L^{-1}). \tag{46}$$

Conclusion, quand $0 < \beta < \min(1/(3d), 1/(2d(1+d/2+d/s)))$ on a

$$\liminf \frac{E(N)}{N} \geq \limsup e_H^N,$$

et même, plus précisément

$$e_H^N \geq \frac{E(N)}{N} \geq e_H^N - C\frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N}, \tag{47}$$

quand $L > CN^{d\beta}$ où $C > 0$ est une constante assez grande mais fixée.

3.2 De Hartree à NLSD

Cette section est consacrée à montrer que l'énergie de Hartree avec le potentiel d'interaction $w_N(x) = N^{d\beta}w(N^\beta x)$ où $w = w_0 + \mathbb{1}_{|x|\geq R_0}K$ converge vers l'énergie de la fonctionnelle de Schrödinger Non-Linéaire. On rappelle ces deux fonctionnelles. Pour $u \in \mathcal{V}$, l'énergie de Hartree s'écrit

$$\mathcal{E}_H(u) = \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V|u|^2 + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} (w_{0,N} \star |u|^2)|u|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} (K_N \mathbb{1}_{|x|\geq \frac{R_0}{N^\beta}} \star |u|^2)|u|^2. \tag{48}$$

La fonctionnelle de Schrödinger Non-Linéaire est obtenue en remplaçant les deux derniers termes par "leur limite pour N grand".

$$\mathcal{E}^d_{nls}(u) = \int_{\mathbb{R}^3} |(\nabla + iA)u|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V|u|^2 + \frac{1}{2}\left(\int_{\mathbb{R}^3} w_0\right)\int_{\mathbb{R}^3} |u|^4 + \int_{\mathbb{R}^3} (K \star |u|^2)|u|^2.$$

Ainsi, va on montrer que dans un certain sens $w_{0,N} \to \left(\int_{\mathbb{R}^3} w_0\right)\delta$ et que $K_N \mathbb{1}_{|x|\geq \frac{R_0}{N^\beta}} \to K$ avec estimation de la vitesse de convergence.

Lemme 3.4. *Pour $u \in \mathcal{V}$, on a*

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla|u|(x)|^2 dx \leq \mathcal{E}_H(u) + C \tag{49}$$

et

$$|\mathcal{E}_H(u) - \mathcal{E}^d_{nls}(u)| \leq CN^{-\beta}\left(1 + \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla|u|(x)|^2 dx\right)^2. \tag{50}$$

Démonstration. Puisque w est classiquement stable, l'énergie d'interaction (somme des deux derniers termes dans (48)) est positive, d'autre part l'hypothèse $V \geq -C$ et l'inégalité diamagnétique $|\nabla|u|| \leq |(\nabla + iA)u|$ permettent de trouver (49).

Estimons séparément les troisième et quatrième termes de (48). Puisque $|x|w_0(x) \in L^1$ d'après l'hypothèse (12), la convergence de l'énergie d'interaction courte portée peut être montrée de la même manière que dans [26] Lemme 4.1, c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{\mathbb{R}^3} (w_{0,N} \star |u|^2)|u|^2 - \left(\int_{\mathbb{R}^3} w_0 \right) \int_{\mathbb{R}^3} |u|^4 \right| \\
=&\iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} |u(x)|^2 w_0(z) \big(|u(x + zN^{-\beta})|^2 - |u(x)|^2 \big) dxdz \\
=&\iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} |u(x)|^2 w_0(z) \left(\int_0^1 \nabla |u|^2 (x + tzN^{-\beta}) \cdot zN^{-\beta} dt \right) dxdz \\
\leq& N^{-\beta} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |z||w_0(z)| \right) \| |u^2 \star \nabla |u|^2 \|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \\
\leq& CN^{-\beta} \|u\|^3_{L^6(\mathbb{R}^3)} \|\nabla |u|\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq CN^{-\beta} \|u\|^4_{H^1(\mathbb{R}^3)}.
\end{aligned}$$

Ce qui donne la convergence avec une estimation de la vitesse pour l'interaction courte portée. Ce raisonnement ne permet cependant pas d'estimer la convergence de l'énergie d'interaction dipole-dipole puisque celle-ci est singulière, en effet $|K(x)| \sim 1/|x|^3$, on a d'autant plus $|x|K(x) \notin L^1(\mathbb{R}^3)$. Mais comme on a pu le voir précédemment la convolution par K s'étend en un opérateur borné sur $L^p(\mathbb{R}^3)$ pour tout $1 < p < \infty$ (cf. [40] Théorème 3), elle coïncide avec la multiplication en Fourier par une fonction $\widehat{K} \in L^\infty$. Et par définition $K \star f = \lim K_\epsilon^\eta \star f$ pour $f \in L^p$ quand $\epsilon \to 0$ et $\eta \to \infty$ avec

$$K_\epsilon^\eta(x) = \mathbb{1}_{\epsilon < |x| < \eta} K(x).$$

On peut voir dans [40] que

$$\widehat{K_\epsilon^\eta}(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \left(\int_\epsilon^\eta \left[e^{2i\pi r|p|p' \cdot y'} - \cos(2\pi r|p|) \right] \Omega(y') \frac{dr}{r} \right) d\sigma(y'), \tag{51}$$

où $p = |p|p'$, $\Omega(y') = 1 - 3\cos(y' \cdot \vec{n})$ et que l'intégrale (51) converge presque partout vers $\widehat{K}$ quand $\epsilon \to 0$ et $\eta \to \infty$. Notre intérêt, en vue de prouver (50), se porte sur la majoration de l'erreur $\int (K_0^{R_0 N^{-\beta}} \star |u|^2)|u|^2$. On a

$$\begin{aligned}
|\widehat{K}_0^{R_0 N^{-\beta}}(p)| \leq& C \int_{\mathbb{S}^2} \int_0^{R_0 N^{-\beta}} \left| e^{2i\pi r|p|p' \cdot y'} - \cos(2\pi r|p|) \right| \frac{dr}{r} d\sigma(y') \\
\leq& C \int_{\mathbb{S}^2} \int_0^{R_0 N^{-\beta}} \left| \frac{\sin(2i\pi r|p|p' \cdot y')}{r} \right| + \left| \frac{\cos(2\pi r|p|p' \cdot y') - \cos(2\pi r|p|)}{r} \right| drd\sigma(y') \\
\leq& C|p|N^{-\beta}.
\end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{\mathbb{R}^3} (K_N \mathbb{1}_{|x| \geq \frac{R_0}{N^\beta}} \star |u|^2)|u|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} (K \star |u|^2)|u|^2 \right| \\
\leq& \int_{\mathbb{R}^3} \widehat{K}_0^{R_0 N^{-\beta}} \widehat{|u|^2} \overline{\widehat{|u|^2}} \leq CN^{-\beta} \int_{\mathbb{R}^3} |p| \left| \widehat{|u|^2} \right|^2,
\end{aligned}$$

or $|p| \left| \widehat{|u|^2} \right| = \left| \widehat{\nabla |u|^2} \right| = 2 \left| \widehat{|u| \nabla |u|} \right|$, d'où

$$\leq CN^{-\beta} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla |u|(x)||u(x)|^3 dx \leq CN^{-\beta} \|u\|^4_{H^1(\mathbb{R}^3)}$$

$\square$

Conclusion : convergence de l'énergie de N particule vers NLSD

En combinant le Théorème 3.1 et le Lemme 3.4 on obtient

$$e_{nls}+CN^{-\beta}\geq\frac{E(N)}{N}\geq e_{nls}-C\frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}}-C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N}-C\frac{N^{d\beta}L}{N}-CN^{-\beta}. \tag{52}$$

3.3 Convergence des états

Dans cette partie, on montre la convergence des matrices densités $\gamma_N^{(k)}$ issues de l'état fondamental de H_N vers une superposition d'états décorrélés minimiseurs de la fonctionnelle de Schrödinger Non-Linéaire dipolaire (modulo une sous-suite), plus précisément on démontre le Théorème 1.4.

Compacité forte des matrices densité

Rappelons que $\operatorname{Tr}\gamma_N^{(k)}=\operatorname{Tr}\operatorname{Tr}_{k+1\to N}\gamma_N=\operatorname{Tr}\gamma_N=1$ et comme $\gamma_N\geq 0$ les suites $(\gamma_N^{(k)})$ sont bornés dans l'espace des opérateurs à trace, on peut donc supposer, quitte à extraire une sous-suite que

$$\gamma_N^{(k)}\rightharpoonup_*\gamma^{(k)} \tag{53}$$

quand $N\to\infty$. On rappelle que l'on a supposé w classiquement stable (23). On a

$$e_{ns}^d+o(1)\geq\frac{\langle\Psi_N,H_N\Psi_N\rangle}{N}\geq\operatorname{Tr}H_1\gamma_N^{(1)}-C. \tag{54}$$

Ainsi $\operatorname{Tr}H_1\gamma_N^{(1)}$ est borné et comme $H_1=-(\nabla+iA)^2+V$ possède une résolvante compacte, on a d'après (53)

$$\operatorname{Tr}\gamma_N^{(k)}=\operatorname{Tr}H_1^{(-1)}H_1^{1/2}\gamma_N^{(k)}H_1^{1/2}\to\operatorname{Tr}H_1^{(-1)}H_1^{1/2}\gamma^{(k)}H_1^{1/2}=\operatorname{Tr}(\gamma^{(k)}). \tag{55}$$

Avec (53) et (55), et d'après [25] Corollaire 2.4 (ou bien [12], [35]) on sait que la convergence est forte dans l'espace des opérateurs à trace, pour tout $k\geq 1$

$$\gamma_N^{(k)}\to\gamma_k. \tag{56}$$

Convergence vers une superposition d'états décorrélés

Rappelons que $\operatorname{Tr}P_-\gamma_N^{(1)}=1+\mathcal{O}(L^{-1})$ cf. (46) d'où

$$\operatorname{Tr}\left[(1-P_-^{\otimes 2})\gamma_N^{(2)}\right]\leq 2\operatorname{Tr}P_+\gamma_N^{(1)}\leq CL^{-1}. \tag{57}$$

On a aussi, voir Lemme 3.2 et Lemme 3.3 que

$$\operatorname{Tr}\left|P_-^{\otimes 2}\gamma_N^{(2)}P_-^{\otimes 2}-\int_{SP_-\mathfrak{H}}|u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\,d\mu_N(u)\right|\leq\frac{CL^{d/s+d/2}}{N}, \tag{58}$$

l'inégalité triangulaire, en combinant (57) et (58)donne alors

$$\operatorname{Tr}\left|\gamma_N^{(2)}-\int_{SP_-\mathfrak{H}}|u^{\otimes 2}\rangle\langle u^{\otimes 2}|\,d\mu_N(u)\right|\leq\frac{C}{L}+\frac{CL^{d/s+d/2}}{N}. \tag{59}$$

Ensuite, notons P_K le projecteur spectral de H_1 sous le niveau d'énergie K, d'après le Lemme 3.2, on a l'hypothèse de tension

$$\lim_{K\to\infty}\lim_{N\to\infty}\mu_N(SP_K\mathfrak{H})=1, \tag{60}$$

ce qui permet d'utiliser le théorème de Prokhorov ([39] Lemme 1) et de conclure qu'à extraction d'une sous-suite près, μ_N converge vers une mesure μ sur la boule unité $B\mathfrak{H}$ de $\mathfrak{H}$, d'où

$$\gamma^{(2)} = \int_{B\mathfrak{H}} |u^{\otimes 2}\rangle \langle u^{\otimes 2}| \, d\mu(u). \tag{61}$$

Comme $\mu(B\mathfrak{H}) \geq 1 = \mu(S\mathfrak{H}))$ car $\lim \operatorname{Tr} \gamma_N^{(2)} = 1$ par convergence forte des matrices densité, la mesure μ n'est supportée que dans la sphère $S\mathfrak{H}$.

La mesure limite ne charge que les minimiseurs de NLSD

D'après (45) et le Lemme 3.4 on a

$$\begin{aligned}
\operatorname{Tr} H_2\gamma^{(2)} &\geq \int_{SP_-\mathfrak{H}} \mathcal{E}^d_{nls}(u) d\mu_N(u) + \int_{SP_-\mathfrak{H}} \big(\mathcal{E}_H(u) - \mathcal{E}^d_{nls}(u)\big) d\mu_N(u) - C\frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N} \\
&\geq \int_{SP_-\mathfrak{H}} \mathcal{E}^d_{nls}(u) d\mu_N(u) - CN^{-\beta} - C\frac{N^{d\beta}}{L^{1/2}} - C\frac{L^{1+d/s+d/2}}{N} - C\frac{N^{d\beta}L}{N},
\end{aligned}$$

en passant à la limite, on obtient

$$e^d_{nls} \geq \int_{S\mathfrak{H}} \mathcal{E}^d_{nls}(u) d\mu(u) \geq e^d_{nls}. \tag{62}$$

Ce qui prouve que μ n'est supportée que sur $\mathcal{M}^d_{nls}$, l'ensemble des minimiseurs de $\mathcal{E}^d_{nls}$.

On peut montrer la convergence des matrices densités d'ordre plus élevé, pour cela il suffit de suivre la même méthode que dans [26].

4 Appendice

4.1 Opérateurs en dimension infinie, opérateurs compacts

En dimension infinie, les applications linéaires, appelées opérateurs, n'ont plus grand chose en commun avec leurs homologues en dimension finie. En particulier, elles ne sont plus nécessairement continues et ne bénéficient pas toutes d'une forme matricielle, même en autorisant un nombre infini de lignes et de colonnes. Retrouver ces propriétés nécessite des hypothèses supplémentaires. Dans la suite, on se place dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Cette section est largement inspiré de [24]

Définition 4.1 (Opérateurs)**.** *Un opérateur sur $\mathcal{H}$ est une application linéaire A définie sur un sous-espace dense $D(A)$ de $\mathcal{H}$.*

Définition 4.2 (Opérateurs bornés)**.** *Un opérateur A sur $\mathcal{H}$ est dit borné si $\sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} < \infty$ pour tout $x \in \mathcal{H}$. Si cette quantité est finie elle est notée $\|A\|$. C'est une norme sur l'espace des opérateurs bornés de $\mathcal{H}$.*

Définition 4.3 (Opérateurs compacts)**.** *Un opérateur A sur $\mathcal{H}$ est dit compact s'il est limite pour la norme d'opérateur d'opérateurs de dimension finie (dont l'image est de dimension finie) ; ou équivalemment, si l'image de la sphère unité par A est compacte.*

Remarque 4.1. *Un opérateur compact est donc nécessairement borné.*

Définition 4.4 (Adjoint d'un opérateur)**.** *L'adjoint d'un opérateur A est l'opérateur A^* de domaine $D(A^*) = \{y \in \mathcal{H} | x \mapsto \langle Ax, y\rangle$ est continue $\}$ est tel que $\langle Ax, y\rangle = \langle x, A^*y\rangle$ pour tout $x \in D(A)$ et $y \in D(A^*)$. Un opérateur A est dit autodjoint si $(A, D(A)) = (A^*, D(A^*))$.*

Définition 4.5 (Espace résolvant et spectre). *L'espace résolvant $\rho(A) \subset \mathbb{C}$ d'un opérateur A est l'ensemble $\rho(A) := \{z \in \mathbb{C}, (A-z) : D(A) \to \mathcal{H}$ est bijectif et de réciproque bornée $\}$. Le spectre de A est défini comme le complémentaire de l'espace résolvant $\sigma(A) := \mathbb{C} \backslash \rho(A)$.*

Le spectre de A contient les valeurs propres de A mais pas seulement. Par exemple dans l'espace de Hilbert $\ell^2(\mathbb{C})$, l'opérateur $A : (u_n) \mapsto (\frac{n}{n+1} u_n)$ n'a pas 1 comme valeur propre, $A - 1$ est bijectif mais $1 \in \sigma(A)$ car la suite $V_k = ((\delta_{k,n})_n)_k$ vérifie $\|V_k\|_2 = 1$ et $(A-1)V_k \to 0$ quand $k \to \infty$ et donc $\|(A-1)^{-1}(A-1)V_k\| / \|(A-1)V_k\| \to \infty$ quand $k \to \infty$ ($(A-1)^{-1}$ n'est pas borné).

Définition 4.6 (Spectre discret et spectre essentiel). *On distingue le spectre discret $\sigma_{\text{disc}}(A)$ d'un opérateur A étant constitué des valeurs propres isolées de A et son complémentaire le spectre essentiel $\sigma_{\text{ess}}(A) := \sigma(A) \backslash \sigma_{\text{disc}}(A)$.*

Théorème 4.1 (Théorème spectral, Th 3 Section XII.2.2 de [14]). *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$ sur $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert séparable. Alors $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ et il existe $d \geq 1$, un borélien $M \subset \mathbb{R}^d$, une mesure de Borel μ sur M localement finie, une fonction $a : M \to \mathbb{R}$ et un opérateur unitaire $U : \mathcal{H} \to L^2(\mathbb{R}^d, d\mu)$ tel que UAU^* soit l'opérateur de multiplication par la fonction a sur $L^2(M, d\mu)$ de domaine*

$$D(UAU^*) = UD(A) = \{f \in L^2(M, d\mu) | af \in L^2(M, d\mu)\}.$$

De plus, on peut prendre $d = 2$ et $M = \sigma(A) \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2$ et $a : (s, n) \mapsto s$.

Le résultat précédent permet de définir la valuation des fonctions boréliennes bornées en les opérateurs autoadjoints par la formule $f(A) = U^* f(a) U$. On a le théorème suivant, sa démonstration repose principalement sur le Théorème 4.1.

Théorème 4.2. *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$, il existe une unique application linéaire*

$$\mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \ni f \mapsto f(A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}),$$

qui à toute fonction borélienne bornée associe un opérateur borné de $\mathcal{H}$ et qui vérifie

- *$f(A)g(A) = (fg)(A)$ pour tous $f, g \in \mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$*
- *$\overline{f}(A) = f(A^*)$ pour tous $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$*
- *$f(A)\| \leq \|f\|_\infty$ pour tous $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$*
- *Si $z \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}$ et $r_z(s) = (z-s)^{-1}$, alors $r_z(A) = (z-A)^{-1}$*
- *Si $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ et $\operatorname{supp}(f) \subset \mathbb{R} \backslash \sigma(A)$ alors $f(A) = 0$*
- *Si $f_n \nearrow f$, alors $f_n(A)x \to f(A)x$ pour tous $x \in \mathcal{H}$.*

Théorème 4.3 (Caractérisation de σ, σ_{ess} et σ_{disc} par les suites de Weyl). *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$. Alors*

- *$\lambda \in \sigma$ si et seulement si il existe une suite $(x_n) \subset D(A)$ telle que $\|x_n\| = 1$ et $(A-\lambda)x_n \to 0$ fortement dans $\mathcal{H}$. Une telle suite est appelée suite de Weyl.*
- *$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}$ si et seulement si il existe une suite $(x_n) \subset D(A)$ telle que $\|x_n\| = 1$ et $(A-\lambda)x_n \to 0$ fortement dans $\mathcal{H}$ et $x_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $\mathcal{H}$. Une telle suite est appelée suite de Weyl singulière.*
- *$\lambda \in \sigma_{\text{disc}}$ si et seulement si toute suite (de Weyl) $(x_n) \subset D(A)$ telle que $\|x_n\| = 1$ et $(A-\lambda)x_n \to 0$ fortement dans $\mathcal{H}$ est précompacte (c'est-à-dire ayant une sous-suite convergente).*

Démonstration. En utilisant le Théorème Spectral 4.1, on se ramène au cas où A est l'opérateur de multiplication par a sur $(L^2(\mathbb{R}^d), d\mu)$ pour $d \geq 0$. Alors, il est aisé de voir que $\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} | \forall \epsilon > 0, \mu\{|a-\lambda| < \epsilon\} > 0\}$. Si $\lambda \in \sigma(A)$, on peut trouver $\|x_n\| = 1$ tel que $(A-\lambda)x_n \to 0$ fortement. Réciproquement, une suite de Weyl associée à $\lambda \in \mathbb{R}$ empêche la continuité d'un inverse de $(A-\lambda)$, ce qui montre le premier point. Pour le second point, on distingue deux cas. Si λ est valeur propre de multiplicité infinie, on prend comme suite de Weyl singulière une famille orthogonale de l'espace propre associé à λ. Sinon, $\mu\{a = \lambda\} = 0$ et on utilise la suite de fonction $f_n = \mu(B_n)^{-1/2} \mathbb{1}_{B_n}$ où $B_n = \{|a-\lambda| < 1/n\} \cap B(0, R_n)$ où R_n est assez grand pour que $B_n \neq \emptyset$ et tend vers l'infini de telle sorte que $f_n \rightharpoonup \mathbb{1}_{\{a=\lambda\}}$ dans $L^2(\mathbb{R}^d, \mu)$, c'est une suite de Weyl singulière puisque dans cet espace, $\mathbb{1}_{\{a=\lambda\}} = 0$. La troisième point utilise la caractérisation des espaces vectoriels de dimension finie par la compacité de leur sphère unité. $\square$

Théorème 4.4 (Théorème Min-Max, Th XIII.1 de [34])**.** *Soit A un opérateur autoadjoint semi-borné inférieurement ($\exists c \in \mathbb{R}, \forall x \in \mathcal{H}\, \langle x, Ax \rangle \geq c\|x\|^2$) de domaine $D(A)$ alors on définit*

$$\mu_k := \inf_{\substack{V \subset D(A) \\ \dim V = k}} \sup_{\substack{x \in V \\ \|x\|=1}} \langle x, Ax \rangle .$$

Alors μ_k est soit la $k^{\text{ème}}$ valeur propre de A, soit $\mu_k = \inf \sigma_{\text{ess}}(A)$.

Théorème 4.5 (Théorème de Hilbert-Schmidt, décomposition des opérateurs autoadjoints compacts)**.** *Soit A un opérateur autoadjoint borné sur $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert de dimension infinie. Alors A est compact si et seulement si $\sigma_{\text{ess}} = \{0\}$. En particulier, il existe une famille orthogonale de vecteurs propres $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ de $\mathcal{H}$ et des réels $\{\lambda_n\}_n^{\infty}$ vérifiant $\lim_{n\to\infty} \lambda_n = 0$ tels que*

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \left| x_n \right\rangle \left\langle x_n \right| . \tag{63}$$

Une manière de montrer ce résultat sans le Théorème spectral 4.1, celle de [34], est d'utiliser que si M est un sous-espace stable par A, $M^{\perp}$ l'est par $A^* = A$. Puis de prendre $M = \overline{\text{vect}\{x_n\}}$ où (x_n) est une base orthogonale des espaces propres de A. Utiliser que si $\sigma(A) = \{0\}$ et que A est autoadjoint alors $A = 0$. Enfin que $\sigma_{\text{ess}}(A) = 0$ car A est compact et donc $\sigma(A_{|M^{\perp}}) = \{0\}$, ce qui entraine $M^{\perp} = \{0\}$ car $M^{\perp}$ ne contient aucun vecteur propre de A.

via le Théorème spectral. Soit A un opérateur compact, on montre premièrement que $\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}$. Soit (x_n) une suite de Weyl (cf. Théorème 4.3) associée à $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}$, comme A est compact, (Ax_n) est précompact, et donc λx_n aussi, mais $x_n \rightharpoonup 0$ et $\|x_n\| = 1$, ce qui n'est possible que si $\lambda = 0$. Donc $\sigma_{\text{ess}} \subset \{0\}$, et $\sigma_{\text{ess}} \neq \emptyset$ sinon $\sigma = \sigma_{\text{disc}}$ est borné et consiste en un nombre fini de valeurs propres de multiplicité finie qui ne peut s'accumuler qu'en un $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}$ (car σ_{disc} est composé des valeurs propres isolées et σ est fermé dans $\mathbb{C}$), donc σ_{disc} est fini et par le théorème spectral $\mathcal{H} \simeq L^2(\bigcup_i^k (\lambda_i, n_i), d\mu)$ qui est de dimension finie, ce qui contredit les hypothèses du théorème. Réciproquement, tout opérateur autoadjoint A qui satisfait $\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}$, est unitairement équivalent par le Théorème spectral 4.1 à (63). Avec (λ_n) n'ayant comme point d'accumulation que 0, la convergence de cette somme montre que A est limite (dans $\mathcal{B}(\mathcal{H})$) d'opérateurs de dimension finie et par conséquent est compact. □

Du Théorème spectral pour les opérateurs autoadjoints compacts 4.5, on en déduit une décomposition canonique des opérateurs compacts mais non nécessairement autoadjoints, c'est la décomposition en valeurs singulières. C'est la généralisation à la dimension infinie, mais restreinte à la classe des opérateurs compacts, de la décomposition du même nom en dimension finie.

Théorème 4.6 (Forme canonique des opérateurs compacts, décomposition en valeurs singulières)**.** *Soit A un opérateur compact, il existe deux familles orthonormées (x_n), (y_n) et une suite de réels positifs décroissante de limite nulle $\mu_1 \geq \mu_2 \geq ... \geq \mu_n \geq ... \geq 0$ telle que*

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \left| y_n \right\rangle \left\langle x_n \right| . \tag{64}$$

Démonstration. Soit A un opérateur compact, l'opérateur A^*A est aussi compact et autoadjoint, il admet donc, d'après le Théorème 4.5 une décomposition du type (63), on note (x_n) la famille orthonormée de vecteurs et (λ_n) la suite de réels positifs (car A^*A est un opérateur positif) décroissante (quitte à la réordonner) de limite nulle de cette décomposition. Alors, on pose $y_n = Ax_n/\lambda_n$ quand $\lambda_n \neq 0$ et on vérifie que cette famille est orthonormée : $\langle y_n, y_p \rangle = \langle x_n, A^*Ax_p \rangle / (\lambda_n \lambda_p) = 0$ et on a (64). □

Remarque 4.2. *Les opérateurs compacts étant bornés (i.e. continus), on les considère toujours définis sur $\mathcal{H}$ tout entier quitte à les prolonger par continuité. Il suffit donc de vérifier qu'ils sont symétriques ($\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle$ pour tout $x, y \in \mathcal{H}$) pour affirmer qu'ils sont autoadjoints.*

Théorème 4.7 (Théorème Min-Max pour les opérateurs compacts)**.** *Soit A un opérateur compact autoadjoint, les valeurs singulières de A ordonnées par ordre décroissant $\mu_1 \geq \mu_2 \geq ... \geq \mu_n \geq ... \geq 0$ vérifient*

$$\mu_k := \inf_{\substack{V \subset D(A) \\ \dim V = k-1}} \sup_{\substack{x \in V^\perp \\ \|x\|=1}} \|Ax\|.$$

Démonstration. On utilise le Théorème Min-Max 4.4 et le fait que les valeurs singulières de A sont les valeurs propres de l'opérateur $\sqrt{A^*A}$. ☐

Remarque 4.3. *Les notations des théorèmes 4.4 et 4.7 pour les valeurs singulières sont inversées.*

Théorème 4.8 (Opérateurs autadjoints à résolvante compacte)**.** *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$. Les assertions suivantes sont équivalentes.*

1. *Il existe $z \in \rho(A)$ tel que $(A-z)^{-1}$ est compact*
2. *Pour tous $z \in \rho(A)$ $(A-z)^{-1}$ est compact*
3. *Le spectre essentiel de A est vide : $\sigma_{\text{ess}} = \emptyset$*
4. *Il existe un famille orthonormale complète de vecteurs propres (x_n) et des valeurs propres (λ_n) isolées de multiplicité finie associés à A vérifiant* $\lim_{n\to\infty} |\lambda_n| = \infty$*. On note*

$$A = \sum_{n\geq 1}^{\infty} \lambda_n \left|x_n\right\rangle \left\langle x_n\right| .$$

Démonstration. $1 \implies 4$: En utilisant le Théorème 4.5 on diagonalise $(A-z)^{-1} = \sum_{n\geq 1}^{\infty} \lambda_n \left|x_n\right\rangle \left\langle x_n\right| .$, alors on a $A = \sum_{n\geq 1}^{\infty}(z + 1/\lambda_n) \left|x_n\right\rangle \left\langle x_n\right|$ et comme (λ_n) n'a que 0 comme point d'accumulation, on a bien $1 + 1/\lambda_n \to \infty$ quand $n \to \infty$.
$4 \implies 3$ et 2 : la forme (63) de A avec (λ_n) n'ayant pas de point d'accumulation et (x_n) étant une famille complète on peut de conclure que $\sigma_{\text{ess}} = \emptyset$, car si $z \notin \sigma_{\text{disc}}$ alors $(A-z)$ est inversible d'inverse continue et même compact.
$3 \implies 4$: aisé utilisant le Théorème spectral 4.1
$2 \implies 1$: Évident. ☐

Définition 4.7 (Perturbation relativement compacte)**.** *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$ et B un opérateur symétrique tel que $D(B) \subset D(A)$. On dit que B est A-compact si $B(A+i)^{-1}$ est compact.*

Théorème 4.9 (Weyl, Théorème 11.2.6 de [11])**.** *Soit A un opérateur autoadjoint de domaine $D(A)$ et B un opérateur symétrique tel que $D(B) \subset D(A)$ et qui est A-compact. Alors $A+B$ est autoadojoint sur $D(A)$ et*

$$\sigma_{\text{ess}}(A+B) = \sigma_{\text{ess}}(A).$$

4.2 Quelques propriétés sur le laplacien et son spectre

4.2.1 Opérateur de Schrödinger à potentiel confinant sur $\mathbb{R}^d$

L'opérateur de Schrödinger est l'opérateur $-\Delta + V$, V représente le potentiel auquel est soumis le système quantique.

Définition 4.8. *Un potentiel est dit confinant s'il existe $f : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ telle que* $\lim_{x\to\infty} f(x) = +\infty$ *et telle que $V(x) \geq f(|x|)$.*

Le terme *confinant* signifie que les particules soumises à ce potentiel devront rester localisées pour pouvoir minimiser l'énergie. Formellement, cette hypothèse entraine la compacité relative des suites minimisantes (en fait , cela concerne toutes les suites dont l'énergie est bornée). On a le théorème suivant.

Théorème 4.10. *[10, Théorème 8.2.1] Si $C \leq V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ alors la forme quadratique*

$$Q(f) := \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f|^2 + V|f|^2 dx \tag{65}$$

définie sur

$$\mathcal{V} = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^3)\,,\ \int |\nabla u|^2 + V|u|^2 < \infty \right\}$$

est la forme d'un opérateur H auto-adjoint et borné inférieurement. L'espace C^∞ est un core pour Q.

Lemme 4.1. *Si $V \in L^1_{\text{loc}}$ est borné inférieurement et confinant alors l'opérateur $H = -\Delta + V$ est un opérateur à résolvante compacte.*

Voir par exemple [42] Lemme 10.

L'opérateur à une particule que nous utilisons dans ce mémoire est néanmoins légèrement différent, il contient un terme supplémentaire A qui représente un champ magnétique ou bien une force de Coriolis. C'est ce terme qui sera à l'origine de l'apparition de vortex. De la même manière on définit

$$\mathcal{V}_A = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^3)\,,\ \int |\big(\nabla + iA\big)u|^2 + V|u|^2 < \infty \right\},$$

comme domaine de la forme $Q_{A,V}(u,v) = \langle u, (-\big(\nabla + A\big)^2 + V) \rangle$.

Théorème 4.11. *[21, Lemme 1,Théorème 1] Supposons $A \in L^2_{\text{loc}}$ et $V \in L^1_{\text{loc}}$ alors $Q_{A,V}$ est une forme symétrique fermée et il existe un unique opérateur auto-adjoint H tel que $Q_{A,V}(u,v) = \langle u, Hv \rangle$ pour tout $u, v \in \mathcal{D}(H) := \big\{ w \in \mathcal{V}_A \,|Q_{A,V}(w,.) \in L^2 \big\}$. Par ailleurs, C_c^∞ est un core pour H.*

Enfin, l'hypothèse V confinant suffit à rendre $H = -\big(\nabla + A\big)^2 + V$ à résolvante compacte.

Théorème 4.12. *[20] Sous les hypothèses du Théorème 4.11 et de l'hypothèse supplémentaire V confinant, alors $(H+i)^{-1}$ est un opérateur compact.*

5 Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de stage M. Lewin pour l'attention dont il a fait preuve, sa pédagogie et son aide dans l'exploration de ces merveilleux domaines que sont la mécanique quantique, l'analyse et la physique mathématique en général. Il a permis à ce stage de fin d'études d'être une fois encore une étape aussi agréable qu'enrichissante dans mon parcours scientifique. Mes remerciements vont aussi à l'université de Paris Dauphine pour m'avoir accueilli.

Références

[1] P. Antonelli and C. Sparber, *Existence of solitary waves in dipolar quantum gases*, Physica D : Nonlinear Phenomena, 240 (2011), pp. 426 – 431.

[2] W. Bao, N. B. Abdallah, and Y. Cai, *Gross-pitaevskii-poisson equations for dipolar bose-einstein condensate with anisotropic confinement*, SIAM J. Math. Anal, 44 (2012), pp. 1713–1741.

[3] Bose, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Zeitschrift fur Physik, 26 (1924), pp. 178–181.

[4] H. Brezis, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, universitext ed., 2010.

[5] F. Brock, *Continuous rearrangement and symmetry of solutions of elliptic problems*, Proc. Indian Acad. Sci. (Math. Sci.), Vol. 110 (2000), pp. 157–204.

[6] R. Carles and H. Hajaiej, *Complementary study of the standing wave solutions of the Gross-Pitaevskii equation in dipolar quantum gases*, ArXiv e-prints, (2014).

[7] 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.

[8] J.-M. 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.

[9] J. G. Conlon, E. H. Lieb, and H.-T. Yau, *The $N^{7/5}$ law for charged bosons*, Commun. Math. Phys., 116 (1988), pp. 417–448.

[10] E. Davies, *Spectral theory and differential operators*, vol. 42 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[11] E. B. Davies, *Linear operators and their spectra*, vol. 106 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.

[12] G. dell'Antonio, *On the limits of sequences of normal states*, Comm. Pure Appl. Math., 20 (1967), p. 413.

[13] R. L. Dobrushin, *Investigation of conditions for the asymptotic existence of the configuration integral of gibbs' distribution*, Theory of Probability & Its Applications, 9 (1964), pp. 566–581.

[14] N. Dunford and J. T. Schwartz, *Linear operators. Part II*, Wiley Classics Library, John Wiley & Sons Inc., New York, 1988. Spectral theory. Selfadjoint operators in Hilbert space, With the assistance of William G. Bade and Robert G. Bartle, Reprint of the 1963 original, A Wiley-Interscience Publication.

[15] F. J. Dyson, *Ground-state energy of a finite system of charged particles*, J. Math. Phys., 8 (1967), pp. 1538–1545.

[16] F. J. Dyson and A. Lenard, *Stability of matter. I*, J. Math. Phys., 8 (1967), pp. 423–434.

[17] M. E. Fisher, *The free energy of a macroscopic system*, Arch. Ration. Mech. Anal., 17 (1964), pp. 377–410.

[18] M. E. Fisher and D. Ruelle, *The stability of many-particle systems*, J. Math. Phys., 7 (1966), pp. 260–270.

[19] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, *Bose-Einstein Condensation of Chromium*, Physical Review Letters, 94 (2005), p. 160401.

[20] A. Iwatsuka, *Magnetic schrödinger operators with compact resolvent*, J. Math. Kyoto Univ., 26 (1986), pp. 357–374.

[21] H. Leinfelder and C. G. Simader, *Schrödinger operators with singular magnetic vector potentials*, Mathematische Zeitschrift, 176 (1981), pp. 1–19.

[22] A. Lenard and F. J. Dyson, *Stability of matter. II*, J. Math. Phys., 9 (1968), pp. 698–711.

[23] M. Lewin, *A mountain pass for reacting molecules*, Ann. Henri Poincaré, 5 (2004), pp. 477–521.

[24] ——, *Variational Methods in Quantum Mechanics.* Lecture notes (University of Cergy-Pontoise), 2010.

[25] M. Lewin, P. T. Nam, and N. Rougerie, *Derivation of Hartree's theory for generic mean-field Bose gases*, preprint arXiv, (2013). preprint arXiv.

[26] M. Lewin, P. Thành Nam, and N. Rougerie, *The mean-field approximation and the non-linear Schrödinger functional for trapped Bose gases*, ArXiv e-prints, (2014).

[27] E. H. Lieb, *The stability of matter : from atoms to stars*, Springer, 1991.

[28] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2001.

[29] 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.

[30] E. H. Lieb and J. P. Solovej, *Ground state energy of the two-component charged Bose gas.*, Commun. Math. Phys., 252 (2004), pp. 485–534.

[31] E. H. Lieb and W. E. Thirring, *Bound on kinetic energy of fermions which proves stability of matter*, Phys. Rev. Lett., 35 (1975), pp. 687–689.

[32] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn, and B. L. Lev, *Strongly dipolar bose-einstein condensate of dysprosium*, Phys. Rev. Lett., 107 (2011), p. 190401.

[33] R. Mottl, F. Brennecke, K. Baumann, R. Landig, T. Donner, and T. Esslinger, *Roton-type mode softening in a quantum gase with cavity mediated long range interactions*, Science, 336 (2012), pp. 1570–1573.

[34] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York, 1978.

[35] D. W. Robinson, *Normal and locally normal states*, Commun. Math. Phys., 19 (1970), pp. 219–234.

[36] N. Rougerie, *De finetti theorems, mean-field limits and bose-Einstein condensation*, ArXiv e-prints, (2015).

[37] D. Ruelle, *Classical statistical mechanics of a system of particles*, Helv. Phys. Acta, 36 (1963), pp. 183–197.

[38] D. Ruelle, *Statistical mechanics. Rigorous results*, Singapore : World Scientific. London : Imperial College Press , 1999.

[39] A. Skorokhod, *Integration in Hilbert space*, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete, Springer-Verlag, 1974.

[40] E. M. Stein, *Singular integrals and differentiability properties of functions*, vol. 2, Princeton university press, 1970.

[41] P. Thành Nam, N. Rougerie, and R. Seiringer, *Ground states of large Bose systems : The Gross-Pitaevskii limit revisited*, ArXiv e-prints, (2015).

[42] A. Triay, *Mémoire de stage L3 - Condensation de Bose-Einstein*, (2013).