

# Condensation de Bose-Einstein

Arnaud Triay

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



ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE LYON

## Introduction

## État fondamental des opérateurs de Schrödinger

## Modèle de Hartree

## Condensation de Bose-Einstein

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

Convergence en énergie

Convergence en loi

### Cas général

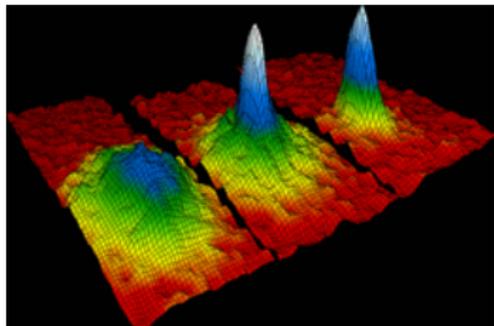
De Finetti en dimension finie

De Finetti en dimension quelconque

## Conclusion

# Un phénomène physique

- ▶ Un nouvel état de la matière
- ▶ Apparaît à très basse température pour un gaz dilué de bosons
- ▶ Un seul état quantique pour toutes les particules



## Historique

- ▶ Bose : prédiction pour les photons (1924)
- ▶ Einstein : généralisations aux bosons (1925)
- ▶ Cornell et Wieman : réalisation du premier condensât (1995), prix Nobel en 2001

## Un peu de mécanique quantique

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

# Un peu de mécanique quantique

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

## Fonction d'onde

L'état quantique d'un ensemble de particules est totalement décrit par un élément appelé fonction d'onde. Du point de vue "position" la fonction d'onde est  $\Psi(x_1, \dots, x_N) \in L^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$  et est telle que  $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$  est la densité de probabilité de la loi de position du système. ( $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ )

# Un peu de mécanique quantique

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

## Fonction d'onde

L'état quantique d'un ensemble de particules est totalement décrit par un élément appelé fonction d'onde. Du point de vue "position" la fonction d'onde est  $\Psi(x_1, \dots, x_N) \in L^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$  et est telle que  $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$  est la densité de probabilité de la loi de position du système. ( $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ )

## Impulsion

Du point de vue "impulsion" (grandeur donnant accès à l'énergie cinétique), la fonction d'onde est transformée de Fourier de la fonction d'onde du point de vue "position" :  $\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)$ . Et  $|\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$  est la densité de la loi de probabilité d'impulsion du système.

# Un peu de mécanique quantique

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

## Fonction d'onde

L'état quantique d'un ensemble de particules est totalement décrit par un élément appelé fonction d'onde. Du point de vue "position" la fonction d'onde est  $\Psi(x_1, \dots, x_N) \in L^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$  et est telle que  $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$  est la densité de probabilité de la loi de position du système. ( $\|\Psi\|_{L^2} = 1$ )

## Impulsion

Du point de vue "impulsion" (grandeur donnant accès à l'énergie cinétique), la fonction d'onde est transformée de Fourier de la fonction d'onde du point de vue "position" :  $\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)$ . Et  $|\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$  est la densité de la loi de probabilité d'impulsion du système.

On fait l'hypothèse que l'état (i.e. la fonction  $\Psi$ ) d'un système quantique est celui qui minimise l'énergie en moyenne.

# Énergie

Les particules sont piégées par un potentiel confinant  $V(x) \rightarrow \infty$  quand  $x \rightarrow \infty$ .

## Énergie

L'énergie du système est

$$\mathcal{E}(\Psi) = \sum_{i=1}^N \int \frac{1}{2m} |p_i|^2 |\hat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2 dp_1 \dots dp_N + \sum_{i=1}^N \int V(x_i) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N,$$

ou encore

$$\mathcal{E}(\Psi) = \sum_{i=1}^N \int \frac{1}{2m} |\nabla_i \Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N + \sum_{i=1}^N \int V(x_i) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N.$$

# Condensation de Bose-Einstein

## Loi marginale

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

## Condensation

On appelle condensation de Bose-Einstein, la convergence de l'état du système, dans un sens à préciser, quand le nombre de particules  $N$  croît, vers un état décorrélé, c'est-à-dire où toutes les particules auraient le même état. Une telle fonction d'onde serait  $u^{\otimes N}(x) = u(x_1) \dots u(x_N)$ .

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

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

ou

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

ou

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

# État fondamental des opérateurs de Schrödinger

- ▶ Une particule

# État fondamental des opérateurs de Schrödinger

- ▶ Une particule
- ▶ Soumise à un potentiel confinant

# État fondamental des opérateurs de Schrödinger

- ▶ Une particule
- ▶ Soumise à un potentiel confinant
- ▶ Existence et unicité de l'état fondamental (modulo  $\mathbb{U}$ )

# État fondamental des opérateurs de Schrödinger

- ▶ Une particule
- ▶ Soumise à un potentiel confinant
- ▶ Existence et unicité de l'état fondamental (modulo  $\mathbb{U}$ )

## Théorème

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

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

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

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

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

## Équation fonctionnelle

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

$$\phi'(0) = 2\Re \left( \int \overline{\nabla u_0} \nabla h + V \overline{u_0} h - \mathcal{E}_0 \overline{u_0} h \right) = 0$$

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

## Existence

Soit une suite minimisante  $(u_N)_N$  de  $\mathcal{E}$  sur la sphère unité de  $L^2$ , elle est alors bornée dans  $H^1$ , on en extrait une sous-suite convergente faiblement dans  $H^1$ , d'après le théorème de Rellich : l'injection canonique  $H^1 \hookrightarrow L^2_{loc}$  est compacte. Enfin, on utilise le caractère confinant du potentiel  $V$  pour étendre la convergence de  $L^2_{loc}$  à  $L^2$ .

# Schéma de preuve

## Existence

Soit une suite minimisante  $(u_N)_N$  de  $\mathcal{E}$  sur la sphère unité de  $L^2$ , elle est alors bornée dans  $H^1$ , on en extrait une sous-suite convergente faiblement dans  $H^1$ , d'après le théorème de Rellich : l'injection canonique  $H^1 \hookrightarrow L^2_{loc}$  est compacte. Enfin, on utilise le caractère confinant du potentiel  $V$  pour étendre la convergence de  $L^2_{loc}$  à  $L^2$ .

## Régularité

- ▶ Équation fonctionnelle
- ▶ Injections de Sobolev
- ▶ Stricte positivité des solutions positives

# Schéma de preuve

## Existence

Soit une suite minimisante  $(u_N)_N$  de  $\mathcal{E}$  sur la sphère unité de  $L^2$ , elle est alors bornée dans  $H^1$ , on en extrait une sous-suite convergente faiblement dans  $H^1$ , d'après le théorème de Rellich : l'injection canonique  $H^1 \hookrightarrow L^2_{loc}$  est compacte. Enfin, on utilise le caractère confinant du potentiel  $V$  pour étendre la convergence de  $L^2_{loc}$  à  $L^2$ .

## Régularité

- ▶ Équation fonctionnelle
- ▶ Injections de Sobolev
- ▶ Stricte positivité des solutions positives

## Unicité

2 méthodes : réécriture de l'énergie ou inégalité de convexité

# Schéma de preuve

## Existence

Soit une suite minimisante  $(u_N)_N$  de  $\mathcal{E}$  sur la sphère unité de  $L^2$ , elle est alors bornée dans  $H^1$ , on en extrait une sous-suite convergente faiblement dans  $H^1$ , d'après le théorème de Rellich : l'injection canonique  $H^1 \hookrightarrow L^2_{loc}$  est compacte. Enfin, on utilise le caractère confinant du potentiel  $V$  pour étendre la convergence de  $L^2_{loc}$  à  $L^2$ .

## Régularité

- ▶ Équation fonctionnelle
- ▶ Injections de Sobolev
- ▶ Stricte positivité des solutions positives

## Unicité

2 méthodes : réécriture de l'énergie ou inégalité de convexité

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

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

# Schéma de preuve

## Existence

Soit une suite minimisante  $(u_N)_N$  de  $\mathcal{E}$  sur la sphère unité de  $L^2$ , elle est alors bornée dans  $H^1$ , on en extrait une sous-suite convergente faiblement dans  $H^1$ , d'après le théorème de Rellich : l'injection canonique  $H^1 \hookrightarrow L^2_{loc}$  est compacte. Enfin, on utilise le caractère confinant du potentiel  $V$  pour étendre la convergence de  $L^2_{loc}$  à  $L^2$ .

## Régularité

- ▶ Équation fonctionnelle
- ▶ Injections de Sobolev
- ▶ Stricte positivité des solutions positives

## Unicité

2 méthodes : réécriture de l'énergie ou inégalité de convexité

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

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

## Modèle de Hartree

On explique le phénomène de condensation comme étant dû au couplage entre l'énergie cinétique, l'énergie potentielle et l'énergie d'interaction entre particules. Le facteur  $1/(N - 1)$  permet aux 3 termes d'avoir le même ordre de grandeur.

### Énergie d'un système à $N$ particules

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

## Modèle de Hartree

On explique le phénomène de condensation comme étant dû au couplage entre l'énergie cinétique, l'énergie potentielle et l'énergie d'interaction entre particules. Le facteur  $1/(N-1)$  permet aux 3 termes d'avoir le même ordre de grandeur.

### Énergie d'un système à $N$ particules

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

### Énergie d'un système à $N$ particules décorélées

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

$\mathcal{E}_H$  est l'énergie de Hartree. On prouve que le système effectif se comporte comme si les particules étaient décorélées, dans le même état qui est l'état fondamental de l'énergie de Hartree.

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire
- ▶ Si  $r > \frac{3}{2}$  et  $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$  alors pour  $w \in L^r$  et  $u \in L^{2p}$  on a  $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire
- ▶ Si  $r > \frac{3}{2}$  et  $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$  alors pour  $w \in L^r$  et  $u \in L^{2p}$  on a  $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$
- ▶ Existence du minimiseur : compacité induite par le potentiel confinant.

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire
- ▶ Si  $r > \frac{3}{2}$  et  $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$  alors pour  $w \in L^r$  et  $u \in L^{2p}$  on a  $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$
- ▶ Existence du minimiseur : compacité induite par le potentiel confinant.
- ▶ Unicité et régularité du minimiseur positif.

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire
- ▶ Si  $r > \frac{3}{2}$  et  $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$  alors pour  $w \in L^r$  et  $u \in L^{2p}$  on a  $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$
- ▶ Existence du minimiseur : compacité induite par le potentiel confinant.
- ▶ Unicité et régularité du minimiseur positif.
- ▶  $\mathcal{E}_H(u) = \mathcal{E}_H(|u|)$ , donc toutes les solutions ont le même module. On pose alors  $\tilde{V} = V + w \star |u|^2$ , potentiel commun à tout les minimiseurs.

# Énergie de Hartree

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

## Théorème

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

- ▶ Non linéaire
- ▶ Si  $r > \frac{3}{2}$  et  $\frac{1}{r} + \frac{2}{p} = 2$  alors pour  $w \in L^r$  et  $u \in L^{2p}$  on a  $|\mathcal{E}_H(u)| < \infty$
- ▶ Existence du minimiseur : compacité induite par le potentiel confinant.
- ▶ Unicité et régularité du minimiseur positif.
- ▶  $\mathcal{E}_H(u) = \mathcal{E}_H(|u|)$ , donc toutes les solutions ont le même module. On pose alors  $\tilde{V} = V + w \star |u|^2$ , potentiel commun à tout les minimiseurs.
- ▶ On réutilise la réécriture de l'énergie avec  $\tilde{V}$  à la place de  $V$  :

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

## Proposition

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

# Condensation en énergie

## Proposition

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

## Preuve

# Condensation en énergie

## Proposition

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

## Preuve

- ▶  $\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2=1}\} \leq \inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2=1}\}$  est clair.

## Proposition

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

## Preuve

- ▶  $\inf\{\mathcal{E}(\Psi), \|\Psi\|_{L^2=1}\} \leq \inf\{\mathcal{E}(u^{\otimes N}), \|u\|_{L^2=1}\}$  est clair.
- ▶ Posons  $\rho(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$ , alors

$$\mathcal{E}(\Psi) \geq N\mathcal{E}_H(\sqrt{\rho}) - \frac{N}{2(N-1)}w(0) \geq Ne_H - \frac{N}{2(N-1)}w(0)$$

# Convergence en loi

## Proposition

On note  $\rho_N(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$  où  $\Psi$  est un état fondamental (il minimise l'énergie). Alors  $\rho_N \rightarrow u_0$  dans  $H^1$  où  $u_0$  est l'unique minimiseur positif de  $\mathcal{E}_H$

# Convergence en loi

## Proposition

On note  $\rho_N(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$  où  $\Psi$  est un état fondamental (il minimise l'énergie). Alors  $\rho_N \rightarrow u_0$  dans  $H^1$  où  $u_0$  est l'unique minimiseur positif de  $\mathcal{E}_H$

## Preuve

# Convergence en loi

## Proposition

On note  $\rho_N(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$  où  $\Psi$  est un état fondamental (il minimise l'énergie). Alors  $\rho_N \rightarrow u_0$  dans  $H^1$  où  $u_0$  est l'unique minimiseur positif de  $\mathcal{E}_H$

## Preuve

- ▶ D'après la convergence en énergie,  $(\sqrt{\rho_N})$  est une suite minimisante de  $\mathcal{E}_H$ .

# Convergence en loi

## Proposition

On note  $\rho_N(x) = \int dx_2 \dots dx_N |\Psi|^2(x, x_2, \dots, x_N)$  où  $\Psi$  est un état fondamental (il minimise l'énergie). Alors  $\rho_N \rightarrow u_0$  dans  $H^1$  où  $u_0$  est l'unique minimiseur positif de  $\mathcal{E}_H$

## Preuve

- ▶ D'après la convergence en énergie,  $(\sqrt{\rho_N})$  est une suite minimisante de  $\mathcal{E}_H$ .
- ▶ Un argument de compacité permet de trouver une valeur d'adhérence, elle minimise  $\mathcal{E}_H$ , c'est donc  $u_0$ .

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

Quelques propriétés sur  $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$  est borné et symétrique, donc autoadjoint.

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$  est borné et symétrique, donc autoadjoint.
- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)} \geq 0$

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$  est borné et symétrique, donc autoadjoint.
- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)} \geq 0$
- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)} \in \mathfrak{S}_1$  et  $\text{tr}(\Gamma_{\Psi}^{(k)}) = 1$

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$  est borné et symétrique, donc autoadjoint.
- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)} \geq 0$
- ▶  $\Gamma_{\Psi}^{(k)} \in \mathfrak{S}_1$  et  $\text{tr}(\Gamma_{\Psi}^{(k)}) = 1$
- ▶  $\rho^{(k)}(x_1, \dots, x_k) = \gamma_{\Psi}^{(k)}(x_1, \dots, x_k; x_1, \dots, x_k)$

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_{\Psi}^{(k)}$

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

# Opérateurs à densité

## Problème

Il n'y a pas d'espace commun aux  $\Psi_N$ .

## Opérateur à densité

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

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

## Quelques propriétés sur $\Gamma_\Psi^{(k)}$

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

## Condensation : cas général

### Énergie du système

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

# Condensation : cas général

## Énergie du système

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

## Théorème de compacité

Si  $\Psi_N$  minimise  $\mathcal{E}$  sur  $S(0, 1)_{L^2(\mathbb{R}^{3N})}$ . Alors, à extraction près, pour tout entier  $k$  on

a :  $\Gamma_{\Psi_N}^{(k)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Gamma^{(k)}$  dans  $\mathfrak{S}_1$ . Et la famille  $(\Gamma^{(k)})_k$  vérifie  $\text{tr}_k(\Gamma^{(k)}) = \Gamma^{(k-1)}$ .

# Condensation : cas général

## Énergie du système

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

## Théorème de compacité

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

## Remarque

Ce résultat de compacité est (encore) essentiellement dû au caractère confinant du potentiel :  $V(x) \rightarrow \infty$  quand  $|x| \rightarrow \infty$  et se traduit par le fait que l'opérateur  $-\Delta + V$  possède une résolvante compacte.

# Condensation : cas général

## Énergie du système

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

## Théorème de compacité

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

## Remarque

Ce résultat de compacité est (encore) essentiellement dû au caractère confinant du potentiel :  $V(x) \rightarrow \infty$  quand  $|x| \rightarrow \infty$  et se traduit par le fait que l'opérateur  $-\Delta + V$  possède une résolvante compacte.

## Théorème de De Finetti quantique

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

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

## Résultat principal

Il est clair que le théorème principal sur la condensation suit du théorème de De Finetti quantique. En effet,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \operatorname{tr} [(-\Delta + \tilde{V} + w)\Gamma^{(2)}] &= \int \frac{1}{2} \langle u^{\otimes 2} | (-\Delta + \tilde{V} + w) | u^{\otimes 2} \rangle d\mu(u) \\ &= \int \mathcal{E}_H(u) d\mu(u) \geq 1 \times e_H = e_H.\end{aligned}$$

Ce qui impose à  $\mu$  d'être la mesure de Dirac supportée par  $u_0$ , état fondamental du modèle de Hartree.

## Résultat principal

Il est clair que le théorème principal sur la condensation suit du théorème de De Finetti quantique. En effet,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \operatorname{tr} [(-\Delta + \tilde{V} + w)\Gamma^{(2)}] &= \int \frac{1}{2} \langle u^{\otimes 2} | (-\Delta + \tilde{V} + w) | u^{\otimes 2} \rangle d\mu(u) \\ &= \int \mathcal{E}_H(u) d\mu(u) \geq 1 \times e_H = e_H.\end{aligned}$$

Ce qui impose à  $\mu$  d'être la mesure de Dirac supportée par  $u_0$ , état fondamental du modèle de Hartree.

$$\Gamma^{(k)} = \int_{S(0,1)_{L^2}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu(u) = |u_0^{\otimes k}\rangle \langle u_0^{\otimes k}|$$

# Démonstration du théorème de De Finetti en dimension finie

## Théorème de De Finetti en dimension finie

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

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

## Lemme : représentation de l'identité

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

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

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

Un argument du type  $\epsilon/3$  permet de conclure.

# Démonstration du théorème de De Finetti en dimension quelconque

## Théorème de Choquet

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

Prenons  $E = \mathfrak{S}_1$  et considérons l'ensemble  $\Lambda$  des suites  $(\gamma^k)_k$  telles que :

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

$\Lambda$  est clairement un convexe et le Théorème de compacité montre que c'est un compact métrique pour  $\text{tr}(|\cdot|)$ .

Pour montrer le résultat, il reste à établir que ses points extrémaux sont les états produits purs  $(\gamma^k) = ((\gamma^1)^{\otimes k})$  où  $\gamma^1$  est un opérateur à densité issu d'une fonction d'onde  $\Psi$ .

## Résultat principal

Il est clair que le théorème principal sur la condensation suit du théorème de De Finetti quantique. En effet,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \operatorname{tr} [(-\Delta + \tilde{V} + w)\Gamma^{(2)}] &= \int \frac{1}{2} \langle u^{\otimes 2} | (-\Delta + \tilde{V} + w) | u^{\otimes 2} \rangle d\mu(u) \\ &= \int \mathcal{E}_H(u) d\mu(u) \geq 1 \times e_H = e_H.\end{aligned}$$

Ce qui impose à  $\mu$  d'être la mesure de Dirac supportée par  $u_0$ , état fondamental du modèle de Hartree.

## Résultat principal

Il est clair que le théorème principal sur la condensation suit du théorème de De Finetti quantique. En effet,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \operatorname{tr} [(-\Delta + \tilde{V} + w)\Gamma^{(2)}] &= \int \frac{1}{2} \langle u^{\otimes 2} | (-\Delta + \tilde{V} + w) | u^{\otimes 2} \rangle d\mu(u) \\ &= \int \mathcal{E}_H(u) d\mu(u) \geq 1 \times e_H = e_H.\end{aligned}$$

Ce qui impose à  $\mu$  d'être la mesure de Dirac supportée par  $u_0$ , état fondamental du modèle de Hartree.

$$\Gamma^{(k)} = \int_{S(0,1)_{L^2}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu(u) = |u_0^{\otimes k}\rangle \langle u_0^{\otimes k}|$$

# Conclusion

## Condensation de Bose-Einstein

L'état d'un système quantique à  $N$  particules tend (à extraction près) au sens des opérateurs à densité, dans  $\mathfrak{S}_1$ , vers un état produit formé par l'état fondamental du modèle de Hartree.

$$\forall k, \Gamma_N^{(k)} \rightarrow |u_0^{\otimes k}\rangle \langle u_0^{\otimes k}| \text{ dans } \mathfrak{S}_1$$

## Remarque

On remarquera que l'on a pas  $\|\Psi_N - u_0^{\otimes N}\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})} \rightarrow 0$ .

