

Inégalités et limites semi-classiques

Arnaud Triay

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

Table des matières

1	Introduction	2
2	Inégalité de Kato-Seiler-Simon	3
2.1	Décomposition en valeurs singulières des opérateurs compacts	3
2.2	Théorie de Calkin pour les idéaux d'opérateurs et normes symétriques	4
2.2.1	Espaces symétriques normés	4
2.2.2	Espaces de Calkin et classification d'idéaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$	5
2.3	Les opérateurs $f(x)g(-i\nabla)$ et $g(-i\nabla)f(x)$	6
2.3.1	Opérateurs à noyau	6
2.3.2	$f(x)g(-i\nabla)$ et $g(-i\nabla)f(x)$	7
2.3.3	Limite semi-classique	7
3	Inégalité de Lieb-Thirring	8
3.1	Le principe de Birman-Schwinger : réécriture du problème	10
3.2	Application à l'inégalité de Lieb-Thirring	10
4	Équilibre d'un gaz à la limite semi-classique	11
4.1	Introduction	11
4.2	État et énergie libre à l'équilibre	11
4.2.1	Cas classique	11
4.2.2	Cas quantique	12
4.3	Équivalence à la limite semi-classique	14
5	Mesures de Gibbs non-linéaires dans un système quantique à plusieurs particules	17
5.1	Mesures de Gibbs	18
5.2	Ensemble grand canonique et seconde quantification	18
5.2.1	Espace de Fock	18
5.2.2	État de Gibbs et entropie relative	20
5.2.3	Opérateurs de création et d'annihilation	20
5.3	États cohérents et mesures de De Finetti	21
5.3.1	Opérateur de translation de Weyl	21
5.3.2	Quantification anti-Wick et mesures de De Finetti	21
5.4	Convergence vers la mesure de Gibbs non-linéaire	22
5.4.1	Schéma intuitif	22
5.4.2	Convergence vers la mesure de Gibbs linéaire (problème sans interaction)	23
5.4.3	Convergence vers la mesure de Gibbs non-linéaire	24
5.4.4	Cas de la dimension finie	25

6	Appendice	26
6.1	Opérateurs en dimension infinie, opérateurs compacts	26
6.2	Quelques propriétés sur le laplacien et son spectre	29
6.2.1	Sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$	29
6.2.2	Opérateur de Schrödinger sur \mathbb{R}^d	29
6.3	Interpolation complexe d'espaces	30
7	Remerciements	32
	Références	33

1 Introduction

Ce rapport traite de différentes inégalités et relations d'équivalence dont l'interprétation physique est la relation entre le monde classique et le monde quantique. En mécanique classique, les systèmes évoluent dans l'espace des phases, par exemple $\mathbb{R}^{2d \times N}$ pour un système à N particules ayant chacune d degrés de liberté. Les observables classiques, telles que l'énergie, sont des fonctions sur l'espace de phases $\mathcal{E}(x, p)$ pour $(x, p) \in \mathbb{R}^{2d \times N}$. En mécanique quantique, un système évolue dans un espace de Hilbert \mathcal{H} (généralement $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour une particule) et les grandeurs quantiques, appelées observables, sont des opérateurs autoadjoints sur \mathcal{H} (application linéaire définie sur un sous-espace dense de \mathcal{H}). Alors, la valeur moyenne d'un observable $Q(A)$, dont l'équivalent classique est noté A , d'un système décrit par $\Psi \in \mathcal{H}$ sera $\langle \Psi | Q(A) | \Psi \rangle_{\mathcal{H}}$ quand cela a un sens. On nomme première quantification l'opération $A \rightarrow Q(A)$. Par exemple, la position x_j a pour première quantification $Q(x_j)$ l'opérateur dans L^2 de multiplication par x_j ; l'impulsion p a pour première quantification l'opérateur $Q(p_j) = -i\hbar \partial_{x_j}$. De sorte que la position et l'énergie cinétique moyenne d'une particule libre $\Psi \in \mathcal{H}$ sont

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

$$\langle \Psi | \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} | \Psi \rangle = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \Psi(x)|^2 dx.$$

Si par exemple la particule est soumise à un potentiel $V(x)$ de sorte que l'énergie classique de celle-ci soit $p^2/(2m) + V(x)$, l'opérateur énergie, appelé hamiltonien, sera $\hat{H} = \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} + V(x)$, où $V(x)$ désigne ici l'opérateur sur L^2 de multiplication par $V(x)$. La première quantification obéit à quelques axiomes. Donnons-nous un système à d degrés de liberté décrit en mécanique classique dans l'espace des phases \mathbb{R}^{2d} et par $L^2(\mathbb{R}^d)$ en mécanique quantique. Alors

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

Cependant, ces règles ne déterminent pas totalement la quantification d'un observable classique, que dire de $\widehat{f(x)g(p)}$? Il faut choisir entre $\widehat{f(x)g(p)}$, $\widehat{g(p)f(x)}$ ou encore d'autres. Le dernier axiome impose à ces choix d'être équivalents à la limite semi-classique, c'est-à-dire quand \hbar est petit devant les autres constantes physiques. Ce n'est néanmoins pas tout le temps le cas, et cela explique parfois la fausseté des modèles classiques. On verra que les deux opérateurs principaux vérifient une relation de commutation $[x, -i\hbar \nabla] = i\hbar \text{Id}$ et que l'on peut interpréter le régime semi-classique comme la commutation à la limite de ces deux opérateurs. Alors, on remarquera que le formalisme développé pourra être utilisé pour résoudre une classe plus large de problèmes dans lesquels interviennent deux opérateurs commutant à la limite.

Dans l'interprétation semi-classique l'espace des phases \mathbb{R}^{2d} est compartimenté en volumes de taille $(2\pi\hbar)$ pouvant chacun être occupé par un état quantique. Et pour une fonction F et un observable classique a , on

voit $\text{Tr}(F(Q(a)))$ comme étant proche à la limite semi-classique de

$$(2\pi\hbar)^{-d} \iint F(a(x, p)) dx dp.$$

On démontrera trois inégalités de ce type : Kato-Seiler-Simon, Golden-Thompson (celles-ci sont exactes, c'est-à-dire que la quantité classique est plus grande que la quantité quantique) et Lieb-Thirring (qui est inexacte dans le sens où il faut rajouter une constante multiplicative).

Le but de ce mémoire est de démontrer des inégalités qui relient des quantités classiques à leur homologue quantique, puis d'étudier la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$ pour certaines de ces quantités. Dans la section 2 on démontrera l'inégalité de Kato-Seiler-Simon (Théorème 2.9), c'est un outil puissant qui donne une borne aux opérateurs à trace $f(x)g(p)$ et $g(p)f(x)$ quand $f, g \in L^p$; on vérifiera qu'ils sont équivalents en régime semi-classique. On montrera ensuite dans la section 3 l'inégalité de Lieb-Thirring (Théorème 3.1) qui majore les puissances des valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$, on s'aidera notamment de l'inégalité de Kato-Seiler-Simon démontrée précédemment. La section 4 est consacrée à montrer l'équivalence des énergies classiques et quantiques d'un gaz à N particules soumis à un potentiel $V(x)$ mais sans interaction entre particules, l'inégalité de KSS sera encore exploitée. Enfin, on expose dans la section 5 les résultats de [7] qui généralisent ce qui a été fait à la section 4 en remplaçant l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V(x)$ par un opérateur autoadjoint positif h , en rajoutant un potentiel d'interaction entre particules $w(x_i - x_j)$ et en autorisant le nombre de particules à varier.

2 Inégalité de Kato-Seiler-Simon

Cette section est consacrée à la démonstration de l'inégalité de Kato-Seiler-Simon. Elle donne une majoration des opérateurs compacts $f(x)g(-i\nabla)$ et $g(-i\nabla)f(x)$ dans l'espace de Schatten \mathcal{J}_p en fonction de f et g dans l'espace de Lebesgue L^p . On construira d'abord les espaces de Schatten comme des idéaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ via les normes symétriques et les espaces de Calkin. Puis, ayant traité les cas $p = 2$ et $p = \infty$, on utilisera une méthode d'interpolation complexe pour étendre le résultat à d'autres p . On construira les espaces de Schatten en suivant [13] et on pourra se référer à [11] pour l'interpolation complexe.

2.1 Décomposition en valeurs singulières des opérateurs compacts

Un opérateur borné A est dit positif et on note $A \geq 0$ si et seulement si $(\phi, A\phi) \geq 0$ pour tout $\phi \in \mathcal{H}$, il s'ensuit que A est autoadjoint. Alors tout opérateur A positif admet une unique racine carrée, c'est-à-dire un opérateur $B \geq 0$ tel que $B^2 = A$. On peut ainsi définir $|A| = \sqrt{A^*A}$ pour tout opérateur borné A et il existe un unique opérateur U tel que $A = U|A|$ et tel que U soit une isométrie sur $\ker(A)^\perp$ et nul sur $\ker(A)$, c'est la décomposition polaire de A . L'application $|\cdot|$ que l'on définit ainsi n'est pas une norme car elle ne vérifie pas l'inégalité triangulaire, elle est cependant définie positive et positivement homogène de degré 1.

La décomposition en valeurs singulières des endomorphismes d'un espace vectoriel de dimension finie se généralise à une classe d'opérateurs sur un espace de Hilbert : ce sont les opérateurs compacts. Le lecteur pourra se référer à la section 6.1 pour un complément de théorie spectrale.

Définition 2.1. *Un opérateur borné est dit compact s'il est limite, pour la norme d'opérateur associée, d'opérateurs de dimension finie.*

Remarque 2.1. *On dit qu'un opérateur est de dimension finie si son image l'est.*

Théorème 2.1 (Hilbert-Schmidt, cf. Théorème 6.5). *Un opérateur autoadjoint compact admet une base orthogonale de vecteurs propres.*

De ce théorème et de l'écriture $A = U|A|$, il vient que tout opérateur compact A admet une décomposition en valeurs singulières, c'est-à-dire qu'il existe deux bases orthonormées $(\phi_n), (\psi_n)$ et des nombres positifs de limite nulle $\mu_1(A) \geq \mu_2(A) \geq \dots \geq 0$ tel que

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(\phi_n, \cdot) \psi_n. \quad (1)$$

On pourra se référer au Théorème 6.6. Les $\mu_n(A)$ sont appelées les valeurs singulières de A , ce sont les valeurs propres de $|A|$. Par convention elles sont ordonnées de manière décroissante. Dans la suite, on voudra caractériser les idéaux d'opérateurs compacts par les valeurs singulières de leurs éléments. On s'intéresse donc aux propriétés de celles-ci. En voici quelques unes qui sont dans notre intérêt pour la suite.

Théorème 2.2 (Théorème Min-Max, cf. Théorème 6.7). *Soit A un opérateur compact, les valeurs singulières de A vérifient*

$$\mu_n(A) = \min_{\substack{\phi_1, \dots, \phi_{n-1} \\ \|\psi\|=1}} \left[\max_{\psi \in \text{vect}(\phi_1, \dots, \phi_{n-1})^\perp} \|A\psi\| \right]. \quad (2)$$

Théorème 2.3. *Pour tout opérateur compact A et tout opérateur borné B , on a*

$$\begin{aligned} \mu_n(AB) &\leq \|B\| \mu_n(A), \\ \mu_n(BA) &\leq \|B\| \mu_n(A). \end{aligned}$$

Démonstration. C'est une conséquence du Théorème Min-Max 2.2, de la propriété de norme d'algèbre de $\|\cdot\|$ sur $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ et que $\mu_n(A) = \mu_n(A^*)$. \square

Théorème 2.4 (Inégalité de Fan). *Pour tout couple d'opérateurs compacts A, B on a*

$$\mu_{n+m+1}(A+B) \leq \mu_{n+1}(A) + \mu_{m+1}(B). \quad (3)$$

Démonstration. On a pour $\psi_1, \dots, \psi_{n+m} \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} \mu_{n+m+1}(A+B) &\leq \max\{\|(A+B)\phi\|, \|\phi\|=1, \phi \in \text{vect } \psi_1, \dots, \psi_{n+m}\} \\ &\leq \max\{\|A\phi\|, \|\phi\|=1, \phi \in \text{vect } \psi_1, \dots, \psi_{n+m}\} + \max\{\|B\phi\|, \|\phi\|=1, \phi \in \text{vect } \psi_1, \dots, \psi_{n+m}\} \\ &\leq \max\{\|A\phi\|, \|\phi\|=1, \phi \in \text{vect } \psi_1, \dots, \psi_n\} + \max\{\|A\phi\|, \|\phi\|=1, \phi \in \text{vect } \psi_{n+1}, \dots, \psi_{n+m}\} \end{aligned}$$

puis en prenant le minimum sur $\psi_1, \dots, \psi_{n+m+1}$ et en utilisant le Théorème Min-max 2.2, on a (3). \square

2.2 Théorie de Calkin pour les idéaux d'opérateurs et normes symétriques

Une matrice $(\alpha_{nm})_{1 \leq n, m \leq N}$ est dite doublement sous-stochastique si

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N |\alpha_{nm}| &\leq 1 \text{ pour } m = 1, \dots, N, \\ \sum_{m=1}^N |\alpha_{nm}| &\leq 1 \text{ pour } n = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

La pertinence de ce concept est ici justifiée par le fait que si $(\phi), (\psi), (\eta), (\gamma)$ sont des familles de vecteurs orthonormés alors $\alpha_{nm} = (\phi_n, \psi_m)(\eta_n, \gamma_m)$ définit une matrice doublement sous-stochastique.

2.2.1 Espaces symétriques normés

Pour une suite $a_n \rightarrow 0$ on définit son réarrangement (a_n^*) , c'est la suite définie par $a_1^* = \max |a_i|$, $a_1^* + a_2^* = \max_{i \neq j} (|a_i| + |a_j|)$, etc. On a $a_1^* \geq a_2^* \geq \dots$

Notons V l'ensemble des suites de nombres presque nulles, c'est-à-dire chacune composée d'un nombre fini de termes non nuls. On appelle *symétrique* une norme Φ sur V si elle vérifie $\Phi(a) = \Phi(a^*)$, c'est-à-dire

si elle est invariante par permutation et dont la valeur en une suite ne dépend que des modules des termes de cette suite. On définit l'espace maximal associé à Φ par

$$s_\Phi = \{(a_n) \in \mathbb{C}^{\mathbb{N}} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(a_1, \dots, a_n, 0, 0, \dots) \text{ existe et est fini} := \Phi(a)\}.$$

Φ induit une norme sur s_Φ . De même, on définit l'espace minimal associé à Φ et on note $s_\Phi^{(0)}$ la fermeture de V dans s_Φ par Φ . Quand $s_\Phi = s_\Phi^{(0)}$ on dit que Φ est régulière.

Théorème 2.5. Soit Φ une norme symétrique. Alors

- Si $a_n \rightarrow 0$, $b_n \rightarrow 0$ et si pour tout $n \geq 1$, $\sum_{m=1}^n b_m^* \leq \sum_{m=1}^n a_m^*$ on a $\Phi(b) \leq \Phi(a)$.
- Si $\Phi(1, 0, 0, \dots) = c$, on a pour tout $a \in s_\Phi : c\|a\|_\infty \leq \Phi(a) \leq c\|a\|_1$.
- s_Φ et $s_\Phi^{(0)}$ sont des espaces de Banach
- Si α est une matrice doublement sous-stochastique et si $a \in s_\Phi$ (resp. $s_\Phi^{(0)}$) alors $\alpha a \in s_\Phi$ (resp. $s_\Phi^{(0)}$) et $\Phi(\alpha a) \leq \Phi(a)$. Où $(\alpha a)_n = \sum_{m=1}^n \alpha_{nm} a_m$.
- Si Φ n'est pas équivalente à $\|\cdot\|_\infty$, alors s_Φ ne comporte que des suites $a_n \rightarrow 0$.
- Si $s_\Phi = s_\Psi$ alors Φ et Ψ sont des normes équivalentes.

2.2.2 Espaces de Calkin et classification d'idéaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$

\mathcal{H} sera un espace de Hilbert. Nous allons voir que l'on peut faire correspondre bijectivement les idéaux bilatères de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ avec certains espaces de suites. On définit notamment les espaces de Schatten \mathcal{J}_p par ce biais comme les idéaux correspondants aux espaces de suites bien connus ℓ^p . On admet qu'un idéal \mathcal{J} contenant un opérateur non compact est nécessairement $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. On note \mathcal{J}_∞ l'idéal bilatère composé de tous les opérateurs compacts. Aussi, pour tout opérateur compact, ses valeurs singulières rangées par ordre décroissant convergent vers 0.

Proposition 2.1. Soit \mathcal{J} un idéal bilatère propre de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Soit A et B deux opérateurs compacts tels que $\mu_n(B) \leq \mu_n(A)$. Alors si $A \in \mathcal{J}$ alors $B \in \mathcal{J}$.

Démonstration. Soit $(\phi), (\psi)$ et $(\eta), (\gamma)$ des familles de vecteurs orthonormés telles que $A = \sum \mu_n(A)(\phi_n, \cdot)\psi_n$ et $B = \sum \mu_n(B)(\eta_n, \cdot)\gamma_n$ soient les décompositions en valeurs singulières de A et B . Soit U l'opérateur qui envoie ψ_n sur $\frac{\mu_n(B)}{\mu_n(A)}\gamma_n$ et V l'opérateur qui envoie η_n sur ϕ_n , U et V sont bornés et $B = UAV$ donc $B \in \mathcal{J}$. \square

Cette propriété amène naturellement à la définition suivante.

Définition 2.2 (Espace de Calkin). Une espace de Calkin est un espace vectoriel s de suites $a_n \rightarrow 0$ vérifiant la propriété de Calkin : si $a \in s$ et $b_n^* \leq a_n^*$ alors $b \in s$.

Définition 2.3. Soit (ϕ_n) une base de \mathcal{H} et $\mathcal{J} \neq \mathcal{L}(\mathcal{H})$. On définit $\mathcal{S}(\mathcal{J}) = \{a = (a_1, \dots) \mid \sum a_n(\phi_n, \cdot)\phi_n \in \mathcal{J}\}$

Réciproquement, on définit

Définition 2.4. Si s est un espace de suite, on définit $\mathcal{I}(s)$ comme étant l'idéal des opérateurs compacts A vérifiant $(\mu_1(A), \dots) \in s$.

L'espace défini ainsi est bien un idéal en vertu des Théorèmes 2.3 et 2.4.

Théorème 2.6 (Calkin). Si s est un espace de Calkin alors $\mathcal{I}(s)$ est un idéal bilatère d'opérateurs et $\mathcal{J}(\mathcal{I}(s)) = s$. Réciproquement si \mathcal{J} est un idéal bilatère alors $\mathcal{S}(\mathcal{J})$ est un espace de Calkin et $\mathcal{I}(\mathcal{S}(\mathcal{J})) = \mathcal{J}$.

Pour Φ une norme symétrique on note $\mathcal{J}_\Phi = \mathcal{I}(s_\Phi)$ et $\mathcal{J}_\Phi^{(0)} = \mathcal{I}(s_\Phi^{(0)})$. En accord avec cette notation, pour $p < \infty$ on a \mathcal{J}_p en prenant $\Phi = \|\cdot\|_p$ (dans ce cas $s_\Phi = \ell^p$). On devrait alors noter $\mathcal{J}_\infty^{(0)}$ les opérateurs compacts mais on garde la notation \mathcal{J}_∞ .

Pour $A \in \mathcal{J}_\Phi$ on note alors $\Phi(A) = \Phi(\mu_1(A), \mu_2(A), \dots)$. Dès lors, un lien fondamental entre les espaces de suites et les espaces de Hilbert est mis en évidence par la proposition suivante.

Proposition 2.2. Notons \mathcal{B} l'ensemble des familles de vecteurs orthonormés. Alors si $A \in \mathcal{J}_\Phi$

$$\Phi(A) = \sup_{\phi, \psi \in \mathcal{B}} \Phi(\psi_n, A\phi_n). \quad (4)$$

Réciproquement, si A est compact et le membre de droite de l'inégalité (4) est fini alors $A \in \mathcal{J}_\Phi$. Si Φ n'est pas équivalente à ℓ^∞ alors 'compact' peut être remplacé par 'borné'.

Démonstration. Soit A un opérateur compact. On décompose $A = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(\phi_n, \cdot)\psi_n$ où $(\phi), (\psi)$ sont deux familles orthonormées. Alors $\Phi(\psi_n, A\phi_n) = \Phi(\mu_n(A)) = \Phi(A)$. Réciproquement, si le membre de droite de (4) est fini alors $A \in \mathcal{J}_\Phi$ et pour $(\eta), (\gamma) \in \mathcal{B}$ on a $(\eta_n, A\gamma_n) = \sum_m a_{nm}\mu_m(A)$ avec $a_{nm} = (\phi_m, \gamma_n)(\eta_n, \psi_m)$ qui définit une matrice doublement sous-stochastique et donc $\Phi(\eta_n, A\gamma_n) \leq \Phi(A)$ par le Théorème 2.5. Si A est juste supposé borné et Φ n'est pas équivalente à ℓ^∞ alors $\sup_{\phi, \psi \in \mathcal{B}} \Phi(\psi_n, A\phi_n) < \infty$ entraîne, par le Théorème 2.5, que $(\psi_n, A\phi_n) \rightarrow 0$. Il est alors aisé de prouver que A est compact. \square

Le théorème suivant repose sur la technique d'interpolation complexe d'espaces de Banach. Cette technique est exposée en annexe en 6.3 et est indépendante des autres sections. On pourra aussi se référer à l'appendice de la section IX.4 de [11]. Pour la suite on note $S = \{z \in \mathbb{C} \mid 0 \leq \operatorname{Re}(z) \leq 1\}$.

Théorème 2.7. Soit Φ_1 et Φ_2 deux normes symétriques sur V , l'espace des suites presque nulles, elles définissent \mathcal{J}_1 et \mathcal{J}_2 . Notons Φ_t la norme d'interpolation complexe définie en (48) et $\mathcal{J}_{(t)}$ l'espace d'opérateurs compacts associé, $0 \leq t \leq 1$.

Soit $z \mapsto A(z)$ une application de la bande S dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ telle que pour tout $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, $(\phi, A(z)\psi)$ est continue, bornée sur la bande et analytique dans l'intérieur de S . Si pour tout $y \in \mathbb{R}$, $A(iy) \in \mathcal{J}_{(0)}$ et $A(1+iy) \in \mathcal{J}_{(1)}$ ainsi que

$$M_t = \sup_y \Phi_t(A(t+iy)) < \infty$$

pour $t \in \{0, 1\}$ alors $A(z) \in \mathcal{J}_{\operatorname{Re}(z)}$ pour tout $z \in S$ et de plus M_t est convexe.

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

2.3.1 Opérateurs à noyau

Théorème 2.8. Si $L^2(M, d\mu)$ est séparable et $A \in \mathcal{J}_2$ alors il existe une unique fonction $K \in L^2(M \times M, d\mu \otimes d\mu)$ telle que pour tout $\phi \in L^2(M, d\mu)$

$$A\phi(x) = \int K(x, y)\phi(y)d\mu(y), \quad (5)$$

pour presque tout x . Réciproquement, tout $K \in L^2(M \times M)$ définit un opérateur $A \in \mathcal{J}_2$ par la formule ci-dessus et $\|A\|_2 = \|K\|_2$.

Démonstration. Soit $A = \sum \mu_n(\phi_n, \cdot)\psi_n$ l'extension canonique de A . Les fonctions $\phi_n(y)\psi_n(x)$ forment une famille orthonormée de $L^2(M \times M)$ et comme $A \in \mathcal{J}_2$, c'est-à-dire $(\mu_n(A)) \in \ell^2$ alors $\sum \mu_n(A)\phi_n(y)\psi_n(x)$ converge dans $L^2(M \times M)$ définissant une fonction K vérifiant (5). Réciproquement, si $K \in L^2(M \times M, d\mu \otimes d\mu)$, l'inégalité de Schwartz donne

$$\left| \int K(x, y)\phi(y)d\mu(y) \right| \leq \left(\int |K(x, y)|^2 d\mu(y) \right)^{1/2} \|\phi\|.$$

Ainsi, la formule (5) définit bien un opérateur borné. De plus si $(\phi), (\psi)$ sont deux familles orthonormées, $\phi(y)\psi(x)$ forme une famille orthonormée dans $L^2(M \times M)$ et

$$\sum |(\phi_n, A\psi_n)|^2 \leq \|K\|_2^2$$

Donc $A \in \mathcal{J}_2$ d'après la Proposition 2.2. $\|A\|_2 = \|K\|_2$ vient en prenant pour $(\phi), (\psi)$ les familles de décomposition de K . \square

2.3.2 $f(x)g(-i\nabla)$ et $g(-i\nabla)f(x)$

L'opérateur $A_1 = f(x)g(-i\nabla)$ sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^d)$ est l'opérateur de noyau $(2\pi)^{-d}f(x)\check{g}(y-x)$ (\check{g} étant la transformée de Fourier inverse de g), c'est-à-dire donné par

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

$f(x)g(-i\nabla)$ se voit comme la composition des deux opérateurs $g(-i\nabla)$ et $f(x)$, $g(-i\nabla)$ étant l'opérateur qui à $\phi \in L^2$ associe la fonction dont la transformée de Fourier est $g(p)\hat{\phi}$, formellement $g(-i\nabla)[\phi] = \mathcal{F}^{-1}[g\mathcal{F}[\phi]]$. Et $f(x)$ est l'opérateur sur L^2 de multiplication par f . Défini sur l'espace de Schwartz \mathcal{S} , cet opérateur admet une unique extension, on admettra cette propriété. On vérifie aisément que pour $\phi, \psi \in \mathcal{S}$ on a

$$(\phi, A\psi)_{L^2} = (\bar{f}\phi, (g\hat{\psi})^\vee)_{L^2}. \quad (6)$$

Théorème 2.9. *Si $f, g \in L^2$ alors $f(x)g(-i\nabla) \in \mathcal{J}_2$ et*

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_2 = \sqrt{\text{Tr}(|f(x)g(-i\nabla)|^2)} = (2\pi)^{-d}\|f\|_2\|g\|_2. \quad (7)$$

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

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_p = \text{Tr}(|f(x)g(-i\nabla)|^p)^{1/p} \leq (2\pi)^{-d}\|f\|_p\|g\|_p. \quad (8)$$

Démonstration. Cas $p = 2$. Comme $f(x)g(-i\nabla)$ est un opérateur sur L^2 de noyau $(2\pi)^{-d}f(x)\check{g}(y-x) \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ alors, d'après le Théorème 2.8, $f(x)g(-i\nabla) \in \mathcal{J}_2$ et $\sqrt{\text{Tr}(|f(x)g(-i\nabla)|^2)} = (2\pi)^{-d}\|f(x)\check{g}(y-x)\|_{L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} = (2\pi)^{-d}\|f\|_2\|g\|_2$.

Cas $2 < p < \infty$. On a $\|f(x)g(-i\nabla)\|_\infty \leq \|f\|_\infty\|g\|_\infty$. Où $\|\cdot\|_\infty$ dans le membre de gauche est la norme d'opérateur sur les compacts \mathcal{J}_∞ , l'inégalité s'obtient par majoration grossière sur (6) et en utilisant la Proposition 2.2. Donc si $f, g \in (L^\infty)_0$ (la fermeture de $L^2 \cap L^\infty$ dans L^∞) alors $f(x)g(-i\nabla) \in \mathcal{J}_\infty$. En effet, un opérateur défini par un tel couple $f, g \in (L^\infty)_0$ est limite d'opérateurs compacts (de \mathcal{J}_2) pour la norme $\|\cdot\|_\infty$ des opérateurs compacts \mathcal{J}_∞ . Quitte à multiplier f et g par des fonctions $|a| = |b| = 1$ on peut supposer $f, g \geq 0$. On peut alors définir pour $0 \leq \text{Re}(z) \leq 1/2$: $F(z) = f^{z/p}(x)g^{z/p}(-i\nabla) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Supposons d'abord que $f, g \in L^\infty$ à support compact alors $F(iy) \in \mathcal{J}_\infty$ avec $\sup_{y \in \mathbb{R}} \|F(iy)\|_\infty \leq 1$ et $F(1/2 + iy) \in \mathcal{J}_2$ avec $\sup_{y \in \mathbb{R}} \|F(1/2 + iy)\|_2 \leq \|f\|_2\|g\|_2$. Alors d'après Théorème 2.7 pour $t \in]0; 1[$ $F(t) \in \mathcal{J}_{2/t}$. En effet, d'après la section précédente, les espaces d'interpolation associés à ℓ^2 et ℓ_0 (l'espaces des suites tendant vers 0) sont les $\ell^{2/t}$. Enfin, disposant de $\|f_n(x)g_n(-i\nabla)\|_p \leq (2\pi)^{-d}\|f_n\|_p\|g_n\|_p$ pour $f_n, g_n \in L^\infty$ et prenant $f_n \rightarrow f$ et $g_n \rightarrow g$ dans L^p on a que $f_n(x)g_n(-i\nabla)$ est de Cauchy dans \mathcal{J}_p donc converge vers un opérateur $A \in \mathcal{J}_p$ vérifiant (8). D'autre part, l'inégalité de Young $\|f(\check{g} \star \phi)\|_2 \leq (2\pi)^{-d}\|f\|_p\|g\|_p\|\phi\|_2$ donne la convergence ponctuelle et montre que $A = f(x)g(-i\nabla)$, ce qui termine la preuve. \square

$g(-i\nabla)f(x)$ est l'opérateur sur L^2 de noyau $(2\pi)^{-d}\check{g}(x-y)f(y)$ c'est-à-dire donné par la formule

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

La méthode d'interpolation sur laquelle est basée la preuve du Théorème 2.9 s'applique de la même manière à l'opérateur $g(-i\nabla)f(x)$ et les résultats du théorème s'étendent à cet opérateur.

2.3.3 Limite semi-classique

Notons $A_1 = f(x)g(-i\nabla)$ et $A_2 = g(-i\nabla)f(x)$, ce sont des opérateurs bornés et même compacts, comme on a pu le voir plus haut. Nous allons voir qu'ils sont équivalents à la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$.

Proposition 2.3. A_1 et A_2 vérifient $\|A_1 - A_2\| \leq (2\pi)^{-d} \|\check{g}(x-y)(f(x) - f(y))\|_{L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)}$.

Démonstration. Pour $\phi \in L^2$ on a, par l'inégalité de Minkowski,

$$\begin{aligned} (2\pi)^d \|(A_1 - A_2)\phi\|_{L^2} &= \left[\int \left| \int \check{g}(x-y)\phi(y)(f(x) - f(y))dy \right|^2 dx \right]^{1/2} \\ &\leq \int \left[\int |\check{g}(x-y)\phi(y)(f(x) - f(y))|^2 dx \right]^{1/2} dy = \int \left[\int |\check{g}(x-y)(f(x) - f(y))|^2 dx \right]^{1/2} |\phi(y)| dy \\ &\leq \left[\int \int |\check{g}(x-y)(f(x) - f(y))|^2 dx dy \right]^{1/2} \|\phi\|_{L^2} \\ &\leq \|\check{g}(x-y)(f(x) - f(y))\|_{L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \|\phi\|_{L^2}. \end{aligned}$$

□

Alors en dilatant et en revenant aux opérateurs quantiques $A_1 = f(x)g(-i\hbar\nabla)$ et $A_2 = g(-i\hbar\nabla)f(x)$ on a

$$\|A_1 - A_2\| \leq C\hbar.$$

3 Inégalité de Lieb-Thirring

Cette section se propose de donner une démonstration de l'inégalité de Lieb-Thirring. Ce résultat est une majoration de la somme de puissances des valeurs propres négatives de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$ pour V suffisamment régulier. Pour toute fonction Z on note $Z_+ = \max\{Z, 0\}$ et $Z_- = \max\{-Z, 0\}$, on a alors $Z = Z_+ - Z_-$ avec $Z_+, Z_- \geq 0$. Cette inégalité est étroitement liée à des problèmes de stabilité de la matière en mécanique quantique puisqu'elle mesure les états liés d'une particule soumise à un potentiel V et donc d'énergie $\mathcal{E}(\psi) = \langle \psi | -\Delta + V | \psi \rangle$.

Définition 3.1 (Valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger). *Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d)$ avec $p > \max(1, d/2)$, on dit que $\lambda \in \mathbb{C}$ est valeur propre de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$, s'il existe $\psi \in H^1$ tel que*

$$-\Delta\psi + V\psi = \lambda\psi, \tag{9}$$

au sens des distributions.

Multiplicité des valeurs propres négatives

Quand $V \in L^{\gamma+d/2}$ avec γ vérifiant (11), une conséquence du Théorème d'injections de Sobolev (Th 8.5 et 8.3 de [8] ou voir la discussion à la section 6.2.2) est que $V|\psi|^2 \in L^1$ et en calculant $\langle \psi | -\Delta + V | \psi \rangle$ pour $\psi \in H^1$, on remarque que dans ce cas les valeurs propres de $-\Delta + V$ sont nécessairement réelles. Toujours sous cette hypothèse, les valeurs propres négatives de l'opérateur $-\Delta + V$ sont toutes de multiplicité finies et ne peuvent s'accumuler qu'en 0, voir Théorèmes 11.5 et 11.6 de [8].

Par ailleurs, sous l'hypothèse plus contraignante $V \in L^p$ avec $\max(2, d/2) \leq p \leq \infty$ quand $d \neq 4$ et $2 < p \leq \infty$ quand $d = 4$, on peut montrer via l'inégalité de Kato-Seiler-Simon (Théorème 2.9) que $-\Delta + V$ est essentiellement autoadjoint C_c^∞ , ce qui signifie qu'il admet une seule extension autoadjointe, son domaine est H^2 et son spectre essentiel est la demi-droite \mathbb{R}_+ . En particulier ses valeurs propres strictement négatives sont toutes de multiplicité finie. Aussi, $\psi \in H^1$ vérifiant (9) au sens des distributions est dans H^2 car alors $-\Delta\psi \in L^2$. Ce cas là est discuté en appendice à la section 6.2.2.

Borne de l'énergie

De plus, pour $\psi \in H^1$, d'après le théorème d'injection de Sobolev (Théorème 8.3 et 8.5 de [8]) $H^1(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^q(\mathbb{R}^d)$ pour $2 \leq q \leq 2d/(d-2)$ pour $d \geq 3$, $2 \leq q < \infty$ pour $d = 2$ et $d \geq 3$, $2 \leq q < \infty$ pour $d = 1$, ceci combiné avec l'inégalité de Hölder donne alors $\langle \psi | V | \psi \rangle \leq \|V\|_p \|\psi\|_q \leq C \|V\|_p (\langle \psi | -\Delta | \psi \rangle + \|\psi\|_2)$, où $p^{-1} + q^{-1} = 2^{-1}$, ce qui revient à $p = d/2 + \gamma$ avec γ vérifiant (11). On a alors pour $R > 0$

$$\langle \psi | V | \psi \rangle \leq C \|V \mathbf{1}_{V>R}\|_p (\langle \psi | -\Delta | \psi \rangle + \|\psi\|_2) + CR \|\psi\|_2.$$

Comme $\|V \mathbf{1}_{V>R}\|_p \rightarrow 0$ quand $R \rightarrow \infty$, on en conclut que l'énergie $\mathcal{E}(\psi)$ est bornée sur la $H^1 \cap \{\|\psi\|_2 = 1\}$.

Ainsi, les valeurs propres négatives étant toutes de multiplicité finie et étant bornées, elles ne peuvent s'accumuler qu'en 0.

Théorème 3.1 (Inégalité de Lieb-Thirring). *Pour $\gamma \geq 0$ vérifiant (11) et pour V tel que $V_- \in L^{\gamma+d/2}(\mathbb{R}^d)$, notons $E_0 \leq E_1 \leq \dots \leq 0$ les valeurs propres négatives de $-\Delta + V$. Alors il existe $L_{\gamma,d} < \infty$ qui ne dépend que de γ et de d tel que*

$$\sum_{j \geq 0} |E_j|^\gamma \leq L_{\gamma,d} \int_{\mathbb{R}^d} V_-(x)^{\gamma+d/2} dx. \quad (10)$$

$$\begin{array}{ll} \gamma \geq 1/2 & \text{si } d = 1 \\ \gamma > 0 & \text{si } d = 2 \\ \gamma \geq 0 & \text{si } d \geq 3 \end{array} \quad (11)$$

L'inégalité de Lieb-Thirring (10) est une inégalité du type semi-classique. En effet, l'idée étant que pour calculer la somme des valeurs propres négatives de l'opérateur autoadjoint $-\Delta + V$, il faille intégrer la partie négative de son noyau. Ainsi on voudrait montrer que

$$\sum_{j \geq 0} |E_j|^\gamma \simeq (2\pi)^{-d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} (p^2 + V(x))_-^\gamma dx dp.$$

Or le membre de droite a pour valeur $\Gamma(\gamma+1)/[(4\pi)^{d/2} \Gamma(\gamma+1+d/2)] \int_{\mathbb{R}^d} V_-(x)^{\gamma+d/2}$, d'où l'expression du membre de droite de (10).

Remarque 3.1. *La preuve proposée ici ne permet pas de démontrer les cas limites $\gamma = 1/2$ pour $d = 1$ et $\gamma = 0$ pour $d \geq 3$.*

La démonstration proposée ici suit globalement celle de [9] (Ch.4) à la différence qu'elle utilise astucieusement l'inégalité de Kato-Seiler-Simon, qui fait l'objet de la première section de ce rapport. En conclusion, on remarque d'abord qu'il suffit de s'intéresser uniquement à V_- . On se sert ensuite d'une méthode appelée principe de Birman-Schwinger qui établit une correspondance entre les valeurs propres et leur multiplicité de l'opérateur $-\Delta + V$ et celles d'une famille d'opérateurs compacts $(K_e)_e$. On montre que $N_e \leq B_e$ où N_e est le nombre de valeurs propres de $-\Delta + V$ inférieures ou égales à $-e$ et où B_e est le nombre de valeurs propres de K_e supérieures à 1. Enfin en réécrivant

$$\sum_{j \geq 0} |E_j|^\gamma = \sum_{j \geq 0} e_j^\gamma = \gamma \int_0^\infty e^{\gamma-1} N_e de \quad (12)$$

et en utilisant que $B_e \leq \text{Tr}(K_e^m)$ ainsi que l'inégalité de Kato-Seiler-Simon, on conclut à la majoration souhaitée. Le reste de la section est consacrée à la démonstration du Théorème 3.1.

En effet, il suffit de prouver le résultat pour $-\Delta - V_-$ car $-\Delta + V \geq -\Delta - V_-$ et l'on sait que si $H_1 \geq H_2$, d'après le théorème du Min-Max (cf. par exemple Th. XIII.1 [12]), les valeurs singulières ordonnées de H_1 sont supérieures à celles de H_2 . Donc $0 \geq E_j(-\Delta + V) \geq E_j(-\Delta - V_-)$ et $|E_j(-\Delta + V)|^\gamma \leq |E_j(-\Delta - V_-)|^\gamma$. Dorénavant on considérera l'opérateur $-\Delta - V_-$.

3.1 Le principe de Birman-Schwinger : réécriture du problème

Pour une valeur propre $-e \leq 0$ de l'opérateur $-\Delta - V_-$, on réécrit l'équation aux valeurs propres de la manière suivante. Pour $\psi \in H^1$,

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

K_e est appelé l'opérateur de Birman-Schwinger. On va voir que c'est un opérateur compact et qu'il est même dans \mathcal{J}_m pour certains m . Il faut donner un sens à la suite d'implications ci-dessus. La première réécriture est clairement vraie au sens des distributions. Pour la seconde, on se sert du fait que $(-\Delta + e)$ est une bijection de $H^1 \rightarrow H^{-1}$. Enfin $K_e = C_e^* C_e$ où $C_e = (-\Delta + e)^{-1/2}\sqrt{V_-} = ((-i\nabla)^2 + e)^{-1/2}\sqrt{V_-}(x) \in \mathcal{J}_{d+2\gamma}$ puisque $(|p|^2 + e)^{-1/2}, \sqrt{V_-}(x) \in L^{d+2\gamma}$ (inégalité de Kato-Seiler-Simon Théorème 2.9) pour $\gamma > 0$.

Ensuite, ϕ ne peut pas être nul, sinon $(\Delta + e)\psi = 0$ ce qui entraîne que $\psi = 0$ aussi. On en déduit que si $-e$ est valeur propre de $(-\Delta - V_-)$, 1 est valeur propre de K_e et de multiplicité au moins celle de $-e$. Remarquons que (K_e) est une suite d'opérateurs décroissants, en effet pour $e < e'$ on a $\mathcal{F}^*(K_e - K_{e'})\mathcal{F} = (|p|^2 + e)^{-1} - (|p|^2 + e')^{-1} > 0$. Donc les valeurs propres de K_e sont décroissantes. Elles sont aussi continues puisque d'après ci-dessus $0 \leq K_e - K_{e'} \leq \frac{e' - e}{e'} K_e$ et donc $K_e(1 + o(e' - e)) \leq K_{e'}$; il vient, d'après le Théorème Min-Max, $\mu_k(e)(1 + o(e - e')) \leq \mu_k(e') \leq \mu(e)$ pour $e \leq e'$. Il s'ensuit que $N_e \leq B_e$ (définitions plus haut).

3.2 Application à l'inégalité de Lieb-Thirring

Par définition de B_e on a pour $m \geq 1$,

$$B_e \leq \text{Tr}(K_e^m) = \text{Tr}(|C_e|^{2m}) \leq \|(|p|^2 + e)^{-1}\|_{L^m}^m \|V_-\|_{L^m}^m. \quad (13)$$

La dernière majoration venant d'une application du Théorème 2.9 (Kato-Seiler-Simon) et les quantités exprimées peuvent être finies ou infinies. Par dilatation du premier facteur, on obtient $B_e \leq C_{m,d} e^{d/2-m}$. Or, si on utilise cette majoration dans (12) on obtient une intégrale divergente, soit en 0, soit en ∞ . Certes, N_e est nul à partir d'un certain e mais celui-ci dépend de V et nous cherchons une constante $L_{\gamma,d}$ n'en dépendant pas. Définissons alors un autre potentiel $W_e(x) = (V(x) + e/2)_-$. Ce potentiel vérifie $W_e \geq V_- - e/2$ et donc vérifie aussi

$$N_e(-V_-) = N_{e/2}(-V_- + e/2) \leq N_{e/2}(-W_e).$$

En remplaçant V_- par W_e et e par $e/2$ dans (13) et en utilisant les majorations ci-dessus, on obtient

$$\begin{aligned} B_e(V_-) &\leq \|(|p|^2 + e/2)^{-1}\|_{L^m}^m \|W_e\|_{L^m}^m \\ &= C_{m,d} e^{d/2-m} \|(|p|^2 + 1)^{-1}\|_{L^m}^m \|(V + e/2)_-\|_{L^m}^m. \end{aligned}$$

En insérant cette inégalité dans (12), on obtient

$$\begin{aligned} B_e(V_-) &\leq C_{m,d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^{2V(x)} e^{\gamma-m+d/2} (V(x)_- - e/2)^m de dx \\ &= C'_{m,d} \|(|p|^2 + 1)^{-1}\|_{L^m}^m \int_0^1 e^{\gamma-m+d/2} (1-e)^m de \int_{\mathbb{R}^d} V_-(x)^{\gamma+d/2} dx. \end{aligned}$$

Cette expression est finie si $d/2 < m < \gamma + d/2$, ce qui est possible puisque l'on a supposé $\gamma > 0$. On pose alors $m = (\gamma + d)/2$. Ainsi si $d = 1$, le résultat est valable pour $\gamma > 1/2$ et si $d \geq 2$ le résultat est valable pour $\gamma > 0$. Ceci termine la démonstration.

4 Équilibre d'un gaz à la limite semi-classique

4.1 Introduction

Cette partie est consacrée à l'étude de la répartition d'un gaz à l'équilibre soumis à un potentiel V . En mécanique classique, l'état d'un tel gaz est représenté par une densité de probabilité μ sur l'espace des phases $(x, p) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ où x est la position des particules et p leur impulsion. À l'équilibre, l'état du gaz minimise l'énergie libre, ou énergie d'Helmholtz, $H - TS$ où H est le hamiltonien du système, S son entropie et T sa température. Ainsi, μ doit minimiser la fonctionnelle

$$\mathcal{E}_{cl}(\mu) = \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} h(x, p) \mu(x, p) dx dp + T \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \mu(x, p) \log(\mu(x, p)) dx dp, \quad (14)$$

avec $h(x, p) = (\hbar p)^2 + V(x)$ représentant le hamiltonien d'une particule et $-\mu(x, p) \log(\mu(x, p))$ qui est la densité d'entropie associée à la mesure μ . On remarque tout de suite que si $T = 0$ alors les mesures μ qui minimisent \mathcal{E}_{cl} sont les combinaisons convexes de fonctions de Dirac en les minima de h , c'est-à-dire les minima $V(x)$ à support sur $p = 0$. L'ajout du terme d'entropie avec la température va étaler les particules autour de ces points d'équilibres.

La trajectoire $(x(t), p(t))$ de chaque particule dans l'espace des phases doit vérifier les équations de Hamilton-Jacobi

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial h}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial h}{\partial x}. \end{aligned}$$

Les mesures candidates pour représenter un état d'équilibre du système sont celles qui sont laissées invariantes par le flot de cette équation différentielle. Notamment, les mesures de Gibbs qui sont de la forme $C^{-1} e^{-h(x, p)}$, où C est une constante de normalisation, et qui sont invariantes par le flot puisque h l'est.

En mécanique quantique, l'état du gaz n'est plus représenté par une mesure sur l'espace des phases mais par un opérateur $\gamma \geq 0$, autoadjoint avec $\text{Tr}(\gamma) = 1$. Il représente toujours la répartition des particules dans l'espace des états à une particule qui est $L^2(\mathbb{R}^d)$. À l'équilibre un état γ minimise l'énergie de Helmholtz et donc la fonctionnelle

$$\mathcal{E}_q(\gamma) = \text{Tr}(H\gamma) + T \text{Tr}(\gamma \log \gamma) \quad (15)$$

où $H = -\hbar^2 \Delta + V$ est le hamiltonien et $\gamma \log \gamma$ est l'opérateur d'entropie. Il faut interpréter la trace comme une moyenne sur tous les états possibles. Dorénavant on prendra $T = 1$ et $\hbar = 1$ jusqu'en 4.3.

4.2 État et énergie libre à l'équilibre

4.2.1 Cas classique

Théorème 4.1. *Si $\mathcal{E}_0 = \iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp < \infty$ alors la fonctionnelle \mathcal{E}_{cl} est minorée sur l'ensemble des mesures de probabilité de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ et atteint son minimum qui vaut*

$$\min_{\mu} \iint (p^2 + V(x)) \mu(x, p) dx dp + \iint \mu(x, p) \log(\mu(x, p)) dx dp = -\log \left[\iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp \right]. \quad (16)$$

De plus, ce minimum est atteint une et une seule fois en la mesure de densité $\mu_0(x, p) = 1/\mathcal{E}_0 e^{-p^2 - V(x)}$.

Notons que \mathcal{E}_{cl} est composée d'un terme linéaire et d'un terme strictement convexe en μ . Ainsi, si il existe un minimum, il doit être unique. Remarquons aussi que (16) est tout le temps vrai, même si $\iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp = \infty$.

Démonstration. On utilise ici l'inégalité de Jensen pour nous donner la minoration, l'existence et l'unicité de la mesure minimisante μ . En effet, réécrivons

$$\frac{\mathcal{E}_{cl}}{\mathcal{E}_0} = \iint \mu(x, p) e^{p^2+V(x)} \log(\mu(x, p) e^{p^2+V(x)}) \frac{1}{\mathcal{E}_0} e^{-p^2-V(x)} dx dp. \quad (17)$$

Alors, la fonction $x \mapsto x \log x$ étant convexe, on peut appliquer l'inégalité de Jensen avec la mesure de densité $\mathcal{E}_0^{-1} e^{-p^2-V(x)}$ à la fonction $g(x, p) = \mu(x, p) e^{p^2+V(x)}$, il vient

$$\frac{\mathcal{E}_{cl}}{\mathcal{E}_0} \geq s \left[\frac{1}{\mathcal{E}_0} \iint g(x, p) e^{-p^2-V(x)} dx dp \right],$$

où $s(x) = x \log(x)$. C'est à dire, puisque $\mu(x, p)$ est une densité de probabilité,

$$\mathcal{E}_{cl} \geq \mathcal{E}_{cl}^{min} := -\log \left(\iint e^{-p^2-V(x)} dx dp \right).$$

L'égalité ayant lieu si et seulement si la fonction $g(x, p)$ est constante car $s : x \mapsto x \log x$ est strictement convexe, c'est-à-dire $\mu(x, p) = \mu_0(x, p) = 1/\mathcal{E}_0 e^{-p^2-V(x)}$. \square

4.2.2 Cas quantique

Dans cette sous section, pour simplifier les calculs et sans perte de généralité, on prend à nouveau $\hbar = 1$. La minoration de l'énergie libre dans le cas quantique est très similaire à celle du cas classique. En se ramenant à des espaces de suites on peut comme dans le cas classique utiliser l'inégalité de Jensen avec une mesure discrète cette fois ci. Toujours dans ce cas on peut utiliser la méthode des multiplicateurs de Lagrange sous la contrainte $\text{Tr}(\gamma) = 1$ pour trouver un extremum de \mathcal{E}_q , cette méthode nécessite de plus précaution car elle fait intervenir des espaces de dimension infinie, elle ne sera pas exposée ici. Enfin, on proposera une troisième méthode qui utilise un résultat de Klein sur la valuation des fonctions de deux variables positives sur les opérateurs auto-adjoint.

Théorème 4.2. *Soit H un opérateur autoadjoint vérifiant $\text{Tr}(e^{-H}) < \infty$ alors la fonctionnelle \mathcal{E}_q définie en (15) est minorée sur l'ensemble des états (opérateurs autoadjoints positifs de trace 1). Elle atteint son minimum qui vaut*

$$\min_{\gamma} \text{Tr}(H\gamma) + \text{Tr}(\gamma \log \gamma) = -\log [\text{Tr}(e^{-H})] \quad (18)$$

De plus, ce minimum est atteint une et une seule fois en $\gamma = e^{-H} / \text{Tr}(e^{-H})$.

Remarquons aussi que (18) est tout le temps vrai, même si $\text{Tr}(e^{-H}) = \infty$ La première démonstration utilise l'inégalité de Jensen.

Démonstration. γ étant autoadjoint et positif, il se diagonalise en base orthonormée : $\gamma = \sum_i \gamma_i(\phi_i, \cdot) \phi_i$. De même, e^{-H} est compact par hypothèse, il se diagonalise donc en une base orthonormée et par conséquent il en est de même pour $H = -\log(e^{-H}) = \sum_i \lambda_i(\psi_i, \cdot) \psi_i$. On ordonne (γ_i) et (λ_i) de telle sorte que (γ_i) soit décroissante de limite nulle et (λ_i) soit croissante de limite $+\infty$. L'énergie libre se réécrit donc comme suit

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

où $a_{i,j} = |(\phi_i, \psi_j)|^2$. Alors, de la même manière que (17), en utilisant que $a_{i,j} e^{-\lambda_j} / \text{Tr}(e^{-H})$ est une densité de mesure du \mathbb{N}^2 , l'énergie libre se formule

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{E}_q}{\text{Tr}(e^{-H})} &= \sum_{i,j} \gamma_i e^{\lambda_j} \log \gamma_i e^{\lambda_j} \frac{a_{i,j} e^{-\lambda_j}}{\text{Tr}(e^{-H})} \\ &\geq s \left[\sum_{i,j} g_{i,j} \frac{a_{i,j} e^{-\lambda_j}}{\text{Tr}(e^{-H})} \right], \end{aligned}$$

en appliquant l'inégalité de Jensen. De $\text{Tr}(\gamma) = 1$ on tire donc

$$\mathcal{E}_q \geq \mathcal{E}_q^{\min} := -\log \text{Tr}(e^{-H}).$$

L'égalité ayant lieu si $\gamma_i = e^{-\lambda_j} \delta_{i,j} / \text{Tr}(e^{-H})$, c'est-à-dire $\gamma = e^{-H}$. Le cas d'égalité dans l'inégalité de Jensen ne permet pas de conclure directement puisqu'il n'y a aucune raison a priori que $a_{i,j} = \delta_{i,j}$ et ce n'est d'ailleurs pas vrai. Ce qui est vrai c'est que l'on peut choisir les familles (ϕ_i) et (ψ_j) pour avoir $a_{i,j} = \delta_{i,j}$ et que l'on a forcément $\gamma = e^{-H} / \text{Tr}(e^{-H})$. Supposons qu'il existe $i < j$ tel que $a_{i,j} \neq 0$ alors comme $(a_{k,l})$ est symétrique on a $\gamma_i e^{\lambda_j} = \gamma_j e^{\lambda_i}$. Si $\gamma_i = 0$ ce qui suit est trivial, on suppose donc sans perte de généralité $\gamma_i \neq 0$. Ayant ordonné (γ_k) et (λ_k) on a

$$1 \leq \frac{\gamma_i}{\gamma_j} = e^{\lambda_i - \lambda_j} \leq 1. \quad (19)$$

Il s'en suit que (γ_k) et (λ_k) sont constantes sur $[[i; j]]$. Supposons alors, sans perte de généralité, le couple (i, j) maximal pour cette propriété (possible puisque $\lambda_k \rightarrow \infty$). Alors pour $(k, l) \notin [[i; j]] \times \mathbb{N} \Delta \mathbb{N} \times [[i; j]]$ on a $a_{k,l} = 0$, en effet le couple (i, j) étant maximal l'inéquation (19) devient stricte et comme $(g_{i,j})$ est constante $(a_{i,j})$ presque partout, on a nécessairement $a_{k,l} = 0$. De la propriété $\sum_k a_{k,l} = \sum_l a_{k,l} = 1$, on obtient que $\text{vect}_{i \leq k \leq j}(\phi_k) = \text{vect}_{i \leq k \leq j}(\psi_k)$. Et donc γ et e^{-H} sont tous les deux égaux sur ces espaces à l'homothétie de rapport $e^{-\lambda_i}$. Le raisonnement ci-dessus étant encore valable si $i = j$, on en déduit que $\gamma = e^{-H}$. \square

Remarque 4.1. Cette méthode montre très clairement l'analogie entre le cas classique et le cas quantique puisque l'inégalité de Jensen est appliquée à une mesure continue dans un cas et discrète dans l'autre. La densité d'états suit une loi normale autour des états privilégiés du modèle à température nulle.

Remarque 4.2. Le fait que le minimiseur γ possède les mêmes espaces propres que l'opérateur énergie H nous conforte dans l'interprétation du phénomène physique. Les états occupés (par l'ensemble de particules) représentés par γ sont des minimiseurs locaux de $\phi \rightarrow (\phi, H\phi)$, c'est-à-dire de l'énergie.

On se propose de donner une autre démonstration basée sur un Théorème de Klein.

Théorème 4.3 (Klein). Soit $n \in \mathbb{N}$ et $f_k, g_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continues bornées, $1 \leq k \leq n$, soient A, B des opérateurs compacts autoadjoints. Si pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^2$

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

alors

$$0 \leq \text{Tr} f(A, B).$$

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

Démonstration. A et B admettent des décompositions spectrales $A = \sum_i \lambda_i (\phi_i, \cdot) \phi_i$ et $B = \sum_j \mu_j (\psi_j, \cdot) \psi_j$ avec $(\lambda_k), (\mu_k)$ décroissantes, alors en posant $a_{i,j} = |(\phi_i, \psi_j)|^2$ on a

$$\text{Tr} f(A, B) = \sum_k \sum_{i,j} f(\lambda_i)g(\mu_j)a_{i,j} = \sum_{i,j} \left(\sum_k f_k(\lambda_i)g_k(\mu_j) \right) a_{i,j} \geq 0.$$

Enfin, le cas d'égalité s'obtient de la même manière que dans la première démonstration. Si $i < j$ et $a_{i,j} > 0$ alors $\text{Tr} f(A, B) = 0$ entraîne $\lambda_i = \mu_j \geq \mu_i = \lambda_j \geq \lambda_i$ et donc égalité dans la suite d'inégalités. Il suffit alors de suivre le raisonnement à partir de (19) pour conclure à $A = B$. \square

Pour minorer l'énergie libre on poursuit comme suit. On pose $s(x) = x \log x$ qui est une fonction convexe. On remarque que la différence d'énergie libre entre un état γ et $\gamma_0 = e^{-H} / \text{Tr}(e^{-H})$ se réécrit

$$\mathcal{E}_q(\gamma) - \mathcal{E}_q(\gamma_0) = \text{Tr} [s(\gamma) - s(\gamma_0) - s'(\gamma_0)(\gamma - \gamma_0)].$$

Alors on applique le Théorème 4.3 avec $f(x, y) = s(x) - s(y) - s'(y)(x - y) \geq 0$ (s est convexe). On obtient

$$\mathcal{E}_q(\gamma) - \mathcal{E}_q(\gamma_0) = \text{Tr} f(\gamma, \gamma_0) \geq 0.$$

Enfin, s étant strictement convexe, on conclut que γ minimise \mathcal{E}_q si et seulement si $\gamma = \gamma_0$.

Remarque 4.3. *Les deux démonstrations sont très similaires, elles utilisent toutes les deux des résultats de convexité pour trouver un minorant et montrent l'unicité de la même manière sur les éléments propres des deux opérateurs γ et γ_0 . La seconde méthode est plus générale et plus abstraite et met moins en valeur le phénomène physique qu'est l'équilibre du gaz.*

4.3 Équivalence à la limite semi-classique

Cette partie est consacrée à montrer la concordance des modèles classique et quantique. C'est-à-dire $\mathcal{E}_q^{min} = \mathcal{E}_{cl}^{min}$. Cette égalité n'aura pas lieu, mais on va voir que dans l'approche semi-classique, à la limite $\hbar \rightarrow 0$ les deux quantités sont équivalentes. En physique, \hbar est très petit ($1,05 \times 10^{-34} m^2.kg.s^{-1}$) mais il faut comparer sa valeur à celle des autres constantes physiques afin de déterminer si on est dans le régime semi-classique. On réécrit d'abord les énergies classiques et quantiques en introduisant la constante de Planck réduite \hbar . Pour le cas classique, on réalise un changement de variable $\mu \rightarrow (2\pi\hbar)^{-d}\mu$ de l'ensemble des densités de probabilité dans lui même. On a donc

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{cl, \hbar}(\mu) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint (p^2 + V(x))\mu(x, p) dx dp + \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint \mu(x, p) \log(\mu(x, p)) dx dp \geq \\ \mathcal{E}_{cl, \hbar}^{min} &= -\log \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp \right] \end{aligned}$$

pour l'énergie classique. Pour l'énergie quantique, on remplace l'hamiltonien $H = -\Delta + V$ par $H = -\hbar^2 \Delta + V$, ce qui donne

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{q, \hbar}(\gamma) &= \text{Tr}((-\hbar^2 \Delta + V)\gamma) + \text{Tr}(\gamma \log \gamma) \geq \\ \mathcal{E}_{q, \hbar}^{min} &= -\log [\text{Tr}(e^{\hbar^2 \Delta + V})]. \end{aligned}$$

On prouve le théorème suivant.

Théorème 4.4. *On a*

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

et comme ces deux quantités tendent vers $-\infty$, on a aussi

$$\mathcal{E}_{cl, \hbar}^{min} \sim \mathcal{E}_{q, \hbar}^{min} \text{ quand } \hbar \rightarrow 0.$$

C'est-à-dire

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^d \text{Tr}(e^{\hbar^2 \Delta - V(x)}) = (2\pi)^{-d} \iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp.$$

On se sert pour cela des résultats exposés plus haut. Montrons d'abord que le membre de droite de (16) est supérieur à celui de (18). Plusieurs démonstrations sont possibles et dans un souci de cohérence nous montrerons d'abord une version affaiblie du résultat avec l'hypothèse supplémentaire V borné inférieurement, car sa démonstration fait intervenir encore une fois l'inégalité de Kato-Seiler-Simon (Théorème 2.9). Pour cette méthode on a recours au Théorème 4.5 connu sous le nom de formule de Trotter. Une démonstration du cas général sera également exposée. Pour l'inégalité inverse, nous montrerons que quand $\hbar \rightarrow 0$ la limite inférieure du membre de gauche de (18) est plus grande que la limite supérieure du membre de gauche de (16).

Théorème 4.5 (Trotter). *Si $-A, -B$ sont des opérateurs autoadjoints bornés inférieurement alors*

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

Voir Théorème VIII.30 [10]. Alors si V est borné inférieurement

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

La seconde inégalité étant en fait l'inégalité de Kato-Seiler-Simon (Théorème 2.9). Ensuite, en prenant la limite quand $n \rightarrow \infty$ et faisant usage de la formule de Trotter (Théorème 4.5) ainsi que du lemme de Fatou, on obtient

$$\operatorname{Tr}(e^{\hbar^2 \Delta - V}) \leq (2\pi\hbar)^{-d} \iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp.$$

Cette inégalité est donc exacte (constante multiplicative égale à 1), voir la discussion sur l'interprétation du semi-classique en fin d'introduction.

Remarque 4.4. *En fait, le résultat plus général $\operatorname{Tr} e^{A+B} \leq \operatorname{Tr}(e^{A/2} e^B e^{A/2})$ pour des opérateurs A, B autoadjoints porte un nom, c'est l'inégalité de Golden-Thompson. Voir corollaire du Théorème XIII.103 de [12].*

Cette méthode, bien que concise suppose V borné inférieurement, voici une démonstration du cas général. On suppose tout de même que $\mathcal{S} \subset D(V)$. On a d'abord recours à deux lemmes.

Lemme 4.1. *Soit $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe et A un opérateur autoadjoint. Alors pour tout $u \in \mathcal{H}$ avec $\|u\| = 1$ on a*

$$(u, F(A)u) \geq F((u, Au)).$$

Démonstration. D'après le théorème spectral (Théorème 3 Section XII.2.2 de [4]) il existe un espace mesuré $(M, d\mu)$, une fonction μ -mesurable a localement bornée et une isométrie $U : \mathcal{H} \rightarrow M$ tel que UAU^* soit l'opérateur de multiplication par a . Alors

$$(u, F(A)u) = \int F(a)|Uu|^2 d\mu \geq F\left(\int a|Uu|^2 d\mu\right) = F((u, Au)).$$

Ce en appliquant l'inégalité de Jensen à la mesure de densité $|Uu|^2 d\mu$. □

Le lemme suivant donne une résolution de l'identité en utilisant la famille de fonctions normées de L^2

$$f_{x,p}(y) = \frac{1}{(\pi\hbar)^{d/4}} e^{-(x-y)^2/2\hbar} e^{ip \cdot y/\hbar}.$$

Le résultat qui suit ainsi que cette famille de fonction font partie d'une théorie plus générale dont l'objet est l'étude des états cohérents et est exposée dans [2]. On y fera brièvement référence plus tard en 5.3.

Lemme 4.2.

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

Démonstration. Soit $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ alors $|f_{x,p}\rangle \langle f_{x,p}|(\varphi)(z) = f_{x,p}(z) \int \overline{f_{x,p}(y)} \varphi(y) dy$ et donc

$$\begin{aligned} \iint dx dp |f_{x,p}\rangle \langle f_{x,p}|(\varphi)(z) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^{d/4}} \iint dx dp f_{x,p}(z) \mathcal{F}_y[e^{-\frac{(x-y)^2}{2\hbar}}](p/\hbar) \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^d}{(\pi\hbar)^{d/2}} \int dx \mathcal{F}_p^{-1} [\mathcal{F}_y[e^{-\frac{(x-y)^2}{2\hbar}} \varphi(y)](p)](z) e^{-\frac{(x-z)^2}{2\hbar}} \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^d}{(\pi\hbar)^{d/2}} \int dx e^{-\frac{(x-z)^2}{\hbar}} \varphi(z) = (2\pi)^d \varphi(z). \end{aligned}$$

□

Ainsi pour un opérateur A on a $\text{Tr}(A) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint dx dp \langle f_{x,p} | A | f_{x,p} \rangle$. Et en combinant les deux lemmes précédents on a

$$\text{Tr}(e^{-H}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint dx dp \langle f_{x,p} | e^{-H} | f_{x,p} \rangle \geq \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint dx dp e^{-\langle f_{x,p} | H | f_{x,p} \rangle}.$$

Or

$$\begin{aligned} \langle f_{x,p} | \hbar^2 \Delta - V | f_{x,p} \rangle &= - \int (y-x)^2 |f_{x,p}(y)|^2 dy - p^2 \int |f_{x,p}(y)|^2 dy - V \star |f_{x,p}|^2(x) \\ &= -d\hbar/2 - p^2 - V \star |f_{x,p}|^2(x). \end{aligned}$$

Finalement,

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

En fait, le terme $V \star |f_{x,p}|^2(x)$ dépend de \hbar et quand $\hbar \rightarrow 0$ on a $V \star |f_{x,p}|^2 \rightarrow V$ presque partout (car $|f_{x,p}|^2$ est une approximation de l'unité quand $\hbar \rightarrow 0$ [8, Thm 2.16]), d'après le lemme de Fatou on a

$$\liminf (2\pi\hbar)^d \text{Tr}(e^{-H}) \geq \iint e^{-p^2 - V(x)} dx dp,$$

et donc

$$\liminf \mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min} \geq 0. \quad (20)$$

Pour l'inégalité inverse on utilise les membres de gauche de (16) et (18). Ayant prouvé précédemment qu'il existe un minimiseur γ de \mathcal{E}_q , on peut écrire

$$\mathcal{E}_{\hbar,q}^{min} = \mathcal{E}_{\hbar,q}(\gamma) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \iint \langle f_{x,p} | H \gamma | f_{x,p} \rangle + \langle f_{x,p} | \gamma \log \gamma | f_{x,p} \rangle dx dp.$$

En utilisant encore une fois le Lemme 4.1, on minore aisément le terme de droite par $(2\pi\hbar)^{-d} \iint m_{\hbar}(x,p) \log(m_{\hbar}(x,p)) dx dp$ avec $m_{\hbar}(x,p) = \langle f_{x,p} | \gamma | f_{x,p} \rangle$. $(2\pi\hbar)^{-d} m(x,p)$ est une densité de probabilité d'après le Lemme 4.2 et parce que γ est autoadjoint positif avec $\text{Tr} \gamma = 1$. Cherchons alors à approximer le terme de gauche par l'équivalent classique $(2\pi\hbar)^{-d} \iint (p^2 + V(x)) m(x,p) dx dp$. Pour cela estimons la différence

$$\iint \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \langle (p^2 - \hbar^2 \Delta) f_{x,p} | \gamma f_{x,p} \rangle + \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \langle (V(x) - V(y)) f_{x,p} | \gamma f_{x,p} \rangle dx dp. \quad (21)$$

Puisque γ est autoadjoint positif compact, on peut l'écrire $\gamma = \sum_i \gamma_i(\phi_i, \cdot) \phi_i$, avec $\gamma_i \rightarrow 0$ et décroissant et (ϕ_i) orthonormale. Alors (21) se réécrit

$$\sum_i \gamma_i \iint \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \langle (p^2 - \hbar^2 \Delta) f_{x,p} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | f_{x,p} \rangle + \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \langle (V(x) - V(y)) f_{x,p} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | f_{x,p} \rangle dx dp. \quad (22)$$

Dans le second terme, on reconnaît

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar(\pi\hbar)^{1/2})^d} \int \mathcal{F}_y [e^{-(x-y)^2/2\hbar} (V(x) - V(y)) \phi_i(y)] (p/\hbar) \overline{\mathcal{F}_y [e^{-(x-y)^2/2\hbar} \phi_i(y)]} (p/\hbar) dp \\ &= \frac{1}{(\pi\hbar)^{d/2}} \int [e^{-(x-y)^2/2\hbar} (V(x) - V(y)) \phi_i(y)] \overline{[e^{-(x-y)^2/2\hbar} \phi_i(y)]} dy \\ &= \int \frac{1}{(\pi\hbar)^{d/2}} e^{-(x-y)^2/\hbar} (V(x) - V(y)) |\phi_i(y)|^2 dy \rightarrow 0 \text{ dans } L^1(\mathbb{R}^d) \end{aligned}$$

quand $\hbar \rightarrow 0$. La convergence vient en partie du fait que $V\phi_i^2 \in L^1$ car $\langle \phi_i | H\gamma | \phi_i \rangle < \infty$. Pour la convergence du premier terme, on utilise que $\mathcal{F}_y[f_{x,p}(y)](\xi) = (4\pi\hbar)^{d/4} e^{-\hbar(\xi-p/\hbar)^2/2} e^{ix \cdot (\xi-p/\hbar)}$

$$\begin{aligned}
& \iint \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \langle (p^2 - \hbar^2 \xi^2)(4\pi\hbar)^{d/4} e^{-\hbar(\xi-p/\hbar)^2/2} e^{ix \cdot \xi} |\hat{\phi}_i\rangle \langle \hat{\phi}_i| (4\pi\hbar)^{d/4} e^{-\hbar(\xi-p/\hbar)^2/2} e^{ix \cdot \xi} \rangle dx dp \\
&= \iint \frac{1}{(2\pi)^d} \mathcal{F}_\xi[(\hbar^2 p^2 - \hbar^2 \xi^2)(4\pi\hbar)^{d/4} e^{-\hbar(\xi-p)^2/2} \hat{\phi}_i](x) \overline{\mathcal{F}_\xi[(4\pi\hbar)^{d/4} e^{-\hbar(\xi-p)^2/2} \hat{\phi}_i]}(x) dx dp \\
&= \iint \frac{\hbar^{d/2}}{\pi^{d/2}} (\hbar^2 p^2 - \hbar^2 x^2) e^{-\hbar(x-p)^2} |\hat{\phi}_i|^2(x) dx dp \\
&= \hbar^2 \int \left(\int \frac{\hbar^{d/2}}{\pi^{d/2}} (p^2 - x^2) e^{-\hbar(x-p)^2} dp \right) |\hat{\phi}_i|^2(x) dx = \hbar \int |\hat{\phi}_i|^2(x) dx \\
&= \hbar/2 \rightarrow 0,
\end{aligned}$$

quand $\hbar \rightarrow 0$. On a ici utilisé le fait que \mathcal{F} est une isométrie de L^2 et que la variance d'une loi normale $\mathcal{N}(x, 1/2\hbar)$ est $1/2\hbar$. Il suffit enfin d'utiliser que γ est dans \mathcal{J}_1 pour passer de la convergence de termes de la série à la convergence de la série elle-même dans (22). Alors on a $\mathcal{E}_{q,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} = \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{cl,\hbar}(m_\hbar) + \mathcal{E}_{cl,\hbar}(m_\hbar) - \mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} \geq \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{cl,\hbar}(m_\hbar) \rightarrow 0$ quand $\hbar \rightarrow 0$. Il vient

$$\liminf \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} \geq 0. \quad (23)$$

De (20) et (23), on conclut que $|\mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} - \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min}| \rightarrow 0$ quand $\hbar \rightarrow 0$ et comme ces deux quantités tendent vers $-\infty$, on a aussi $\mathcal{E}_{cl,\hbar}^{min} \sim \mathcal{E}_{q,\hbar}^{min}$ quand $\hbar \rightarrow 0$.

5 Mesures de Gibbs non-linéaires dans un système quantique à plusieurs particules

Une idée récurrente dans notre travail est le fait qu'en mécanique quantique, dans l'espace de Hilbert qui décrit les états des systèmes étudiés, les deux observables que sont les opérateurs X et P ne commutent et qui ont un défaut de commutativité :

$$[X, P] = i\hbar \text{Id}_{\mathcal{H}} \quad (24)$$

Cela entraîne que la dimension de \mathcal{H} est nécessairement infinie (la trace d'un commutateur étant nulle en dimension finie). Par ailleurs ce défaut de commutativité a pour paramètre \hbar qui est la constante de Planck réduite et qui a une très petite valeur physique. L'analyse semi-classique devient donc l'étude du problème quand $\hbar \rightarrow 0$, ce qui revient à montrer l'équivalence du modèle quantique, et sous quelles conditions, avec le modèle classique. Il se trouve d'autre part que le formalisme développé pour résoudre ce problème convient à une classe plus vaste de problèmes dans laquelle intervient un couple d'opérateurs ayant un défaut de commutativité tendant vers 0. En effet, le théorème de Stone - Von Neumann affirme (sous certaines conditions) que deux opérateurs vérifiant (24) sont unitairement équivalents à X et $P = -i\hbar\nabla$ sur L^2 . Ces derniers seront remplacés par d'autres opérateurs, les opérateurs de création et d'annihilation de particules.

Ce qui suit traite des systèmes avec un nombre de particules variable, c'est-à-dire des systèmes ouverts, avec une force d'interaction particule-particule. Le but est de montrer que les mesures de Gibbs, vues précédemment, apparaissent aussi dans ce cadre et permettent de calculer les valeurs moyennes des observables à la limite $T \rightarrow \infty$ (qui est l'analogue de $\hbar \rightarrow 0$) et caractérisent les états limites. La difficulté est double, d'une part l'espace des états est plus complexe car il doit prendre en compte le nombre de particules, d'autre part l'ajout d'une interaction entre particules rend le problème non-linéaire.

La philosophie du problème est de voir les états admissibles, c'est-à-dire ceux dont l'énergie est bornée, comme un convexe compact dont les points extrémaux sont les états produits $|u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}|$. Alors chaque état possède une mesure dite de De Finetti dont le moment d'ordre 1 est ce même état (c'est-à-dire la moyenne suivant cette mesure des états extrémaux). La structure du problème ne permet pas d'appliquer directement

un théorème de De Finetti comme on a pu le faire précédemment en [14] (inspiré de [6]), mais l'idée reste la même et fait l'objet de travaux en cours [7] dont ce qui suit en est tiré.

On considère ici des systèmes bosoniques dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, l'énergie d'une particule de fonction d'onde u est alors donnée par l'énergie de Hartree

$$\mathcal{E}_H(u) = \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dx dy,$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique de la particule et le second à l'énergie d'interaction, w étant l'intensité du potentiel d'interaction entre les particules.

5.1 Mesures de Gibbs

Les mesures de Gibbs sont les mesures de la forme

$$d\mu(u) = Z^{-1} e^{-\mathcal{E}(u)} du,$$

où \mathcal{E} est l'énergie de la particule u . Leur pertinence a été justifiée précédemment (cf 4.1). Commençons par donner la mesure de Gibbs sur $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$ du système sans interaction. Pour cela donnons nous une base spectrale orthogonale associée à $-\Delta$ (qui est à résolvante compacte puisque Ω est borné) $(\lambda_i, u_i) \in \mathbb{C} \times L^2(\Omega)$ et notons $\alpha_i = \langle u_i, u \rangle \in \mathbb{C}$ les coordonnées de u dans cette base. Cette mesure s'écrit

$$d\mu_0(u) = \bigotimes_{j \geq 1} \frac{\lambda_j}{\pi} e^{-\lambda_j |\alpha_j|^2} d\alpha_j = Z_0^{-1} e^{-\int_{\Omega} |\nabla u|^2} du. \quad (25)$$

Ensuite, compte tenu de la forme de l'énergie de Hartree, on prendra pour mesure de Gibbs, pour décrire le système avec interaction, la suivante

$$d\mu(u) = Z_r^{-1} e^{-F_{NL}(u)} d\mu_0,$$

où $F_{NL}(u) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} |u(x)|^2 |u(y)|^2 w(x-y) dx dy$ et

$$Z_r = \int_{L^2(\Omega)} e^{-F_{NL}(u)} d\mu_0(u). \quad (26)$$

Cette notation a un sens dans L^2 seulement pour $d = 1$, sinon il faut la considérer dans des espaces de Sobolev négatifs. Nous ne discuterons que du cas $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ avec $d = 1$ mais on peut généraliser les quantités plus haut à des espaces de Banach plus généraux et remplacer $-\Delta$ par un opérateur autoadjoint h vérifiant $\text{Tr}(h^{-1}) < \infty$.

5.2 Ensemble grand canonique et seconde quantification

5.2.1 Espace de Fock

L'ensemble grand canonique est le cadre approprié pour l'étude de systèmes à nombre de particules variable. Il est souvent appelé ensemble μVT , car l'on fixe le potentiel chimique μ (la manière avec laquelle le système interagit avec le reste du monde) représenté ici par w , le volume V et la température T . On le formalise ainsi, soit \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable, introduisant l'espace de Fock pour bosons

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

où $\bigotimes_s^n \mathcal{H}$ est le produit tensoriel symétrique de n copies de \mathcal{H} . Dans notre cas, on aura $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$. Et pour $f_1, \dots, f_n \in \mathcal{H}$ on définit leur produit tensoriel symétrique

$$f_1 \otimes_s \dots \otimes_s f_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\sigma} f_{\sigma(1)} \otimes \dots \otimes f_{\sigma(n)}.$$

On définit aussi l'opérateur nombre de particules

$$\mathcal{N} = 0 \oplus 1 \oplus 2 \oplus \dots = \bigoplus_{n=1}^{\infty} n \text{Id}_{\otimes_s^n \mathcal{H}}.$$

Ici, un état du système est un opérateur autoadjoint $\Gamma \geq 0$ sur $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ vérifiant $\text{Tr}(\Gamma) = 1$. On ne traitera ici que d'états qui commutent avec \mathcal{N} et qui donc s'écrivent

$$\Gamma = G_0 \oplus G_1 \oplus \dots$$

avec G_n agissant sur $\otimes_s^n \mathcal{H}$. On définit aussi les matrices densité à k -particules d'un état Γ

$$\Gamma^{(k)} = \sum_{n \geq k} \binom{n}{k} \text{Tr}_{k+1 \rightarrow n}(G_n), \quad (27)$$

où $\text{Tr}_{k+1 \rightarrow n}$ désigne la trace partielle associée à $n - k - 1$ variables. Ces matrices densités ont besoin d'hypothèses supplémentaires pour exister, notamment une condition suffisante est $\text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathcal{N}^k \Gamma) < \infty$. Dans cet espace, on calcule la valeur moyenne d'un état en prenant la trace de cet état contre un observable, c'est-à-dire un opérateur autoadjoint. En particulier, si l'observable du système à une particule h , on construit

$$\mathbb{H}_0 = 0 \oplus \bigoplus_{n \geq 1} \left(\sum_{j=1}^n h_j \right),$$

où $h_j = 1 \otimes \dots \otimes h \otimes \dots \otimes 1$ (avec h en j -ème position). C'est l'opérateur à une particule, appelé ainsi car il est une somme d'opérateurs agissant sur une particule à la fois. De la même manière, si les interactions entre particules sont décrites par un observable w agissant sur l'espace à deux particules $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$ alors on construit sur l'espace de Fock l'opérateur

$$\mathbb{W} = 0 \oplus 0 \oplus \bigoplus_{n \geq 2} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq n} w_{ij} \right),$$

où les w_{ij} agissent sur les particules i et j . On montre facilement que les valeurs moyennes de ces observables peuvent être exprimés en fonction des matrices densités à une et deux particules.

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}_0 \Gamma) &= \text{Tr}_{\mathcal{H}}(h \Gamma^{(1)}) \\ \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{W} \Gamma) &= \text{Tr}_{\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}}(w \Gamma^{(2)}). \end{aligned}$$

\mathbb{H}_0 et \mathbb{W} sont appelés les secondes quantifications de h et w , bien qu'il n'y ait pas de raison physique comme pour la première quantification. Le hamiltonien global s'écrit

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

où λ est un paramètre faisant varier l'intensité du potentiel d'interaction. Les matrices densités définies en (27) se révèlent utiles car elles permettent d'exprimer les valeurs moyennes des observables. On a

$$\text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}_0 \Gamma) = \text{Tr}_{\mathcal{H}}(h \Gamma^{(1)})$$

et

$$\text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{W} \Gamma) = \text{Tr}_{\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}}(w \Gamma^{(2)}).$$

5.2.2 État de Gibbs et entropie relative

Étant donné un opérateur autoadjoint \mathbb{H} sur $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ avec $\text{Tr}(\exp(-\mathbb{H})) < \infty$ (le hamiltonien) et $T > 0$ (la température), on définit l'état de Gibbs du système décrit par le hamiltonien à température T par

$$\Gamma_T = Z^{-1} \exp(-\mathbb{H}/T) \quad (28)$$

où

$$Z = \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\exp(-\mathbb{H}/T)) \quad (29)$$

est la fonction de partition du système. Comme on a pu le voir précédemment, cf. Théorème 4.2, cet état est apparaît naturellement comme étant l'unique minimiseur de l'énergie libre. C'est-à-dire qu'il est solution du problème variationnel suivant

$$\inf_{\Gamma \geq 0, \text{Tr} \Gamma = 1} \{ \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}\Gamma) + T \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma \log \Gamma) \}.$$

En effet, on a

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}\Gamma) + T \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma \log \Gamma) - \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathbb{H}\Gamma_T) + T \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma_T \log \Gamma_T) \\ = T \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma(\log(\gamma) - \log \Gamma_T)) \geq 0. \end{aligned}$$

Avec égalité, si et seulement si $\Gamma = \Gamma_T$, voir Théorème 4.2 pour un cas particulier.

Définition 5.1. Dans le cas où $\mathbb{H} = \mathbb{H}_0$ est la seconde quantification de $h > 0$ les états de Gibbs correspondants sont appelés **états quasi-libres** et leurs matrices densité sont données par

$$\Gamma_T^{(k)} = \left[\frac{e^{-\mathbb{H}_0/T}}{\text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\exp(-\mathbb{H}_0/T))} \right]^{(k)} = \left(\frac{1}{e^{h/T} - 1} \right)^{\otimes k}$$

Pour la suite, on introduit les notations

$$\begin{aligned} \Gamma_{\lambda, T} &= Z_{\lambda}(T)^{-1} \exp\left(-\frac{\mathbb{H}_{\lambda, n}}{T}\right), \\ Z_{\lambda}(T) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \text{Tr} \left[\exp\left(-\frac{\mathbb{H}_{\lambda, n}}{T}\right) \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Respectivement l'état de Gibbs associé au système et sa fonction de partition. Nous nous intéresserons fortement au cas $\lambda = 1/T$, la pertinence de ce choix sera expliquée plus tard.

5.2.3 Opérateurs de création et d'annihilation

On définit les opérateurs de création et d'annihilation sur $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ de la manière suivante, pour $f \in \mathcal{H}$, on a

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

Il envoie les états à n particules sur les états à $n + 1$ particules. Son adjoint (formel, car il peut y avoir des problèmes de domaine) $a(f)$ est donné par

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

En particulier ces deux opérateurs vérifient des relations de commutativités :

$$\begin{aligned} [a(g), a^\dagger(f)] &= \langle g, f \rangle \mathbf{1}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} \\ [a(g), a(f)] &= 0. \end{aligned}$$

5.3 États cohérents et mesures de De Finetti

5.3.1 Opérateur de translation de Weyl

On note $W(u) = \exp(a^\dagger(u) - a(u))$ l'opérateur de translation de Weyl. Il apparaît naturellement dans le cadre de la quantification de Weyl, qui consiste à réaliser l'association $\exp(-i(\alpha x + \beta p)) \rightarrow \exp(-i(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}))$ où \hat{x} est l'opérateur de multiplication par x et $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. En notant $a = (\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2\hbar}$ et $a^\dagger = (\hat{x} - i\hat{p})/\sqrt{2\hbar}$, on montre que ces opérateurs sont unitairement équivalents aux opérateurs de création et d'annihilation précédemment définis sous certaines hypothèses (notamment si $\mathcal{H} \simeq \mathbb{R}^{2d}$), mais ce n'est pas l'objet du présent texte. On considère donc l'opérateur de Weyl à partir des opérateurs de création et d'annihilation définis en 5.2.3. On a le lemme suivant, la seconde ligne justifie en outre la terminologie employée.

Lemme 5.1 (Prop 118 [2]). *On a :*

1. $W(u)^* = W(-u) = W(u)^{-1}$
2. $W(u)^*a(v)W(u) = a(v) + \langle v, u \rangle$ et $W(u)^*a^\dagger(v)W(u) = a^\dagger(v) + \langle v, u \rangle$
3. $W(u)W(v) = W(u+v)e^{-i\Im\langle u, v \rangle}$
4. $W(u) = \exp(a^\dagger(u) - a(u)) = e^{-\frac{|u|^2}{2}} \exp(a^\dagger(u)) \exp(-a(u))$

La démonstration de ce lemme se trouve dans [2] mais il est important de souligner ici que la clef de la démonstration réside dans le fait que $[a(u), a^\dagger(v)] = \|u\|^2 \mathbf{1}$ et donc commute avec $a(w)$ et $a^\dagger(w)$. En effet, en appliquant cette propriété à la formule de Baker-Campbell-Hausdorff (résultat de combinatoire) :

$$\log(e^X e^Y) = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) - \frac{1}{24}[Y, [X, [X, Y]]] + \dots$$

on obtient aisément la troisième et la quatrième ligne du Lemme 5.1.

5.3.2 Quantification anti-Wick et mesures de De Finetti

Définition 5.2. *Un état cohérent $\xi(u)$ est défini comme un état propre de l'opérateur d'annihilation $a(u)$ de la valeur propre 1.*

$$a(u) |\xi(u)\rangle = |\xi(u)\rangle$$

Étant donné les résultats du Lemme 5.1 il est aisé de montrer que

$$|\xi(u)\rangle = e^{-\frac{|u|^2}{2}} \bigoplus_{j \geq 0} \frac{1}{\sqrt{j!}} u^{\otimes j}.$$

Une propriété importante des états cohérents est la résolution de l'identité pour tout sous-espace de dimension finie $\mathcal{V} \subset \mathcal{H}$:

$$\int_{\mathcal{V}} |\xi(u)\rangle \langle \xi(u)| du = \pi^{\dim V} \mathbf{1}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}. \quad (31)$$

Où $|\xi(u)\rangle \langle \xi(u)|$ est vu comme le projecteur sur $|\xi(u)\rangle$ dans $\mathcal{F}(\mathcal{V})$ et l'identité sur $\mathcal{F}(\mathcal{V}^\perp)$. En fait, $\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \mathcal{F}(\mathcal{V}) \oplus \mathcal{F}(\mathcal{V}^\perp)$. On a aussi la propriété

$$a(u)\xi(v) = \langle u, v \rangle \xi(v). \quad (32)$$

Remarque 5.1. *La famille de fonctions $(f_{x,p})$ définie en 4.3 a évidemment un lien avec celle des $(\xi(u))$, c'est la famille des états cohérents canonique, c'est-à-dire celle de l'oscillateur harmonique à nombre fini de degrés de liberté $((x, p) \in \mathbb{R}^{2d})$. Ici $u \in L^2$, vit dans un espace de dimension infinie. La résolution de l'identité formulée en (31) et dans le Lemme 4.2 sont en particulier une propriété commune aux états cohérents. Il existe une théorie générale des états cohérents et de leurs applications, on pourra par exemple se référer à [2].*

Maintenant, étant donné une suite $0 < \epsilon_n \rightarrow 0$, on définit la quantification anti-Wick d'une fonction bornée continue à support inclus dans \mathcal{V} , $b \in C_b^0(\mathcal{V})$ comme

$$\mathbb{B}_{\epsilon_n} = (\epsilon_n \pi)^{-\dim \mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} b(u) |\xi(u/\sqrt{\epsilon_n}) \langle \xi(u/\sqrt{\epsilon_n}) | du. \quad (33)$$

La mesure de De Finetti associée à une suite d'états (Γ_n) d'échelle (ϵ_n) est alors définie comme la limite faible contre les fonctions b .

Définition 5.3. Soit (Γ_n) une suite d'états sur l'espace de Fock $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ et $0 < \epsilon_n \rightarrow 0$. Une mesure ν sur \mathcal{H} est dite de De Finetti par rapport à la suite d'états (Γ_n) à l'échelle (ϵ_n) si pour tout sous-espace de dimension finie $\mathcal{V} \subset \mathcal{H}$ et pour toute fonction $b \in C_b^0(\mathcal{V})$, on a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Tr}[\mathbb{B}_{\epsilon_n} \Gamma_n] = \int_{\mathcal{H}} b(u) d\nu(u). \quad (34)$$

L'équation (34) garantit l'unicité d'une telle mesure puisque une mesure sur \mathcal{H} est déterminée par l'espérance des fonctions continues bornées sur les sous-espaces de dimension finie. D'autre part, il est possible de reformuler le membre de gauche de (34)

$$\text{Tr}[\mathbb{B}_{\epsilon_n} \Gamma_n] = \int_{\mathcal{V}} b(u) d\mu_{\mathcal{V}, \Gamma_n}^{\epsilon_n}(u)$$

où $d\mu_{\mathcal{V}, \Gamma_n}^{\epsilon_n}(u) = (\epsilon_n \pi)^{-\dim \mathcal{V}} \langle \xi(u/\sqrt{\epsilon_n}, \Gamma_n \xi(u/\sqrt{\epsilon_n})) \rangle$. $\mu_{\mathcal{V}, \Gamma_n}^{\epsilon_n}$ est la fonction de Husimi associée à (Γ_n) et à la résolution de l'identité. On peut remarquer que la convergence (34) revient à ce que $d\mu_{\mathcal{V}, \Gamma_n}^{\epsilon_n} \rightarrow \nu_{\mathcal{V}}$ pour tout \mathcal{V} de dimension finie.

5.4 Convergence vers la mesure de Gibbs non-linéaire

Nous allons exposer ici des propriétés ainsi que des schémas de preuves relatifs à la convergence vers la mesure de Gibbs non-linéaire du modèle quantique dans le cadre de la limite de champ-moyen $T \rightarrow \infty$. Dans ce cadre, on suppose que l'interaction entre particules représentée par $\lambda \mathbb{W}$ varie de manière inversement proportionnelle à la température T , c'est-à-dire $\lambda = 1/T$. Nous justifions ce choix de λ . Dans toute la suite on se place dans le cas $\mathcal{H} = L^2(I)$ où $I \subset \mathbb{R}$ est un intervalle borné. Les résultats exposés ci-dessous sont généralisables à $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ à condition de se restreindre à un certain sous-espace de \mathcal{H} , mais elles ne sont pas l'objet de cette partie. Aussi, on gardera la notation \mathcal{H} pour faire référence au cas général.

5.4.1 Schéma intuitif

Pour justifier le choix $\lambda = 1/T$, plaçons-nous dans le cadre qui nous intéresse $d = 1$ et $\mathcal{H} = L^2(I)$ où $I \subset \mathbb{R}$ est un intervalle borné, $-d^2/dx^2$ et w est l'opérateur de multiplication par $W(x-y)$. Dans cet espace, on décrit les opérateurs $a(f)$ et $a^\dagger(f)$, pour $f \in L^2(I)$, sur l'espace de Fock $\mathcal{F}(L^2(I))$ au sens des distributions de la manière suivante

$$a^\dagger(f)[\Psi](x_1, \dots, x_{k+1}) = \frac{1}{\sqrt{k+1}} \sum_{j=1}^{k+1} f(x_j) \Psi(x_1, \dots, \hat{x}_j, \dots, x_{k+1}),$$

$$a(f)[\Psi](x_1, \dots, x_{k-1}) = \sqrt{k} \int_I \overline{f(x)} \Psi(x, x_1, \dots, x_{k-1}) dx$$

pour $\Psi \in L_s^2(I^k)$. De manière plus fondamentale, on note $a^\dagger(x) = a^\dagger(\delta_x)$ et $a(x) = a(\delta_x)$ et l'on a

$$a^\dagger(f) = \int_I f(x) a^\dagger(x) dx,$$

$$a(f) = \int_I \overline{f(x)} a(x) dx.$$

Ainsi pour un opérateur \hat{A} sur $\mathcal{H} = L^2(I)$, sa seconde quantification sur l'espace de Fock peut s'écrire

$$\begin{aligned} \mathbb{A} &= \sum_{i,j} \langle e_i, \hat{A}e_j \rangle a^\dagger(e_i)a(e_j) = \sum_{i,j} \langle e_i, \hat{A}e_j \rangle \int_I \int_I e_i(x)\overline{e_j(y)}a^\dagger(x)a(y)dx dy \\ &= \int_I a^\dagger(x)\hat{A}a(x)dx, \end{aligned}$$

où (e_i) est une base de $L^2(I)$. De la même manière, on justifie l'écriture $\mathbb{W} = 1/2 \int_I \int_I W(x-y)a^\dagger(x)a^\dagger(y)a(y)a(x)dx dy$. Alors on peut écrire

$$\frac{\mathbb{H}_\lambda}{T} = \frac{1}{T} \int_I \nabla a^\dagger(x) \cdot \nabla a(x)dx + \frac{\lambda}{2T} \int_I \int_I W(x-y)a^\dagger(x)a^\dagger(y)a(y)a(x)dx dy. \quad (35)$$

Cette écriture exprime \mathbb{H}_λ en fonction des opérateurs a^\dagger et a tout comme le hamiltonien sur $L^2(I)$ \hat{H} s'exprime en fonction de X et $P = -i\hbar\nabla$ dans 4.3. Le point fondamental ici est de voir $1/\sqrt{T}$ comme un paramètre semi-classique, c'est-à-dire un défaut de commutativité de deux opérateurs qui disparaît quand $T \rightarrow \infty$. On considère alors naturellement les nouveaux opérateurs $b := a/\sqrt{T}$ et $b^\dagger := a^\dagger/\sqrt{T}$ ($[b, b^\dagger] = 1/T$) et on choisit $\lambda = 1/T$ pour que les deux termes de (35) soient du même ordre et ainsi se ramener à un cas analogue à ce qui a déjà été traité à la section 4. En effet, lorsque \mathcal{H} est de dimension finie, on a vu que

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathcal{H})} \left(\exp\left(-\frac{\hat{H}}{T}\right) \right) \sim \left(\frac{T}{\pi}\right)^{\dim \mathcal{H}} \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}_H(u))du.$$

Mais la représentation de Schrödinger à n degré de liberté est isomorphe à la représentation de (Bargmann-) Fock via la transformée de Bargmann. Se référer au paragraphe 1.3 de [2]. Et donc,

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} \left(\exp\left(-\frac{\mathbb{H}_{1/T}}{T}\right) \right) \sim \left(\frac{T}{\pi}\right)^{\dim \mathcal{H}} \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}_H(u))du. \quad (36)$$

Dans le cas général, $\dim \mathcal{H}$ est infinie et cela nous amène à considérer la fonction de partition relative $Z_\lambda(T)/Z_0(T)$ définie dans (30) et fait apparaître la fonction de partition relative non-linéaire Z_r définie dans (26).

5.4.2 Convergence vers la mesure de Gibbs linéaire (problème sans interaction)

Définition 5.4. On définit les *matrices densité à k particules sans interaction* par

$$\gamma_0^{(k)} := \int_{\mathcal{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu_0(u). \quad (37)$$

Alors on a le lemme suivant.

Lemme 5.2. Soit $h \geq 0$ un opérateur autoadjoint sur \mathcal{H} tel que $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(h^{-1}) < \infty$ alors

$$\gamma_0^{(k)} = k!(h^{-1})^{\otimes k}.$$

Ce dernier lemme permet de conclure à la convergence (forte) des matrices densités des états quasi-libres vers les matrices densité sans interaction définies en (37). On a le résultat suivant.

Lemme 5.3. Soit $h \geq 0$ un opérateur autoadjoint sur \mathcal{H} tel que $\mathrm{Tr}(h^{-1}) < \infty$. Soit μ_0 la mesure gaussienne définie en (25) et $\gamma_0^{(k)}$ la matrice densité à k particules définie en (37). Alors on a

$$\frac{k!}{T} \Gamma_{0,T}^{(k)} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \gamma_0^{(k)} = \int_{\mathcal{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu_0(u) = k!(h^{-1})^{\otimes k}$$

fortement dans l'espace de Schatten $\mathfrak{S}(\otimes_s^k \mathcal{H})$, pour tout $k \geq 1$. De plus, le nombre de particules du système se comporte comme

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\mathcal{N}\Gamma_{0,T})}{T} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(h^{-1})\infty.$$

Ceci donne le comportement des états de Gibbs dans la limite de champ moyen $\lambda = 1/T$, qu'en est-il du reste ? Le théorème suivant donne l'existence de mesures de De Finetti pour une classe de suite d'états plus grande.

Théorème 5.1. *Soit $h > 0$ un opérateur autoadjoint avec une résolvante compacte et soit $\{\Gamma_n\}$ une suite d'états sur l'espace de Fock et une suite $0 < \epsilon_n \rightarrow 0$, supposons qu'il existe $1 \leq \kappa \leq \infty$ tel que*

$$\mathrm{Tr}(\epsilon_{n_j}^s \Gamma_{n_j}) \leq C_s.$$

pour $s = \kappa$ si $\kappa < \infty$ et pour $1 \leq s \leq \kappa$ si $\kappa = \infty$. Alors il existe une mesure de probabilité borélienne ν sur \mathcal{H} qui est la mesure de De Finetti d'une sous-suite Γ_{n_j} à l'échelle ϵ_{n_j} . C'est-à-dire

$$\lim_{n_j \rightarrow \infty} \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma_{n_j} \mathbb{B}_{\epsilon_{n_j}}) = \int_{\mathcal{H}} b(u) d\nu(u)$$

pour tout $b \in C_b^0(V)$ pour tout sous-espace de dimension finie $V \subset \mathcal{H}$. $\mathbb{B}_{\epsilon_{n_j}}$ est l'anti-quantification de Wick définie en (33). De plus,

$$k!(\epsilon_{n_j}) \Gamma_{n_j}^{(k)} \rightharpoonup \int_{\mathcal{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\nu(u)$$

faiblement dans $\otimes_s^k \mathcal{H}$ pour $1 \leq k < \kappa$.

5.4.3 Convergence vers la mesure de Gibbs non-linéaire

Dans cette section on suppose que $h > 0$ est un opérateur autoadjoint sur \mathcal{H} vérifiant $\mathrm{Tr}(h^{-1}) < \infty$, on suppose de même que $w \geq 0$ est un opérateur autoadjoint sur $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$ tel que

$$\int_{\mathcal{H}} \langle u \otimes u, w u \otimes u \rangle d\mu_0(u) = \mathrm{Tr}_{\otimes_s^2 \mathcal{H}} [wh^{-1} \otimes h^{-1}] < \infty \quad (38)$$

Pour un espace de Banach \mathcal{H} non nécessairement $L^2(I)$, la mesure de Gibbs non-linéaire généralisée dans Z_r défini en (26), fait sens grâce à (38) c'est-à-dire est strictement positive, et s'exprime

$$Z_r := \int_{\mathcal{H}} \exp(-\langle u \otimes u, w u \otimes u \rangle) d\mu_0(u) \in]0, 1]. \quad (39)$$

La mesure de Gibbs non-linéaire est donc

$$d\mu(u) = Z_r^{-1} \exp(-\langle u \otimes u, w u \otimes u \rangle) d\mu_0(u) \quad (40)$$

où $d\mu_0$ est définie en (25) en remplaçant $-\Delta$ par h . On a le théorème suivant.

Théorème 5.2. *Soit $h \geq 0$ et $w \geq 0$ deux opérateurs autoadjoints respectivement sur \mathcal{H} et $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$ tels que*

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(h^{-1}) + \mathrm{Tr}_{\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}}(wh^{-1} \otimes h^{-1}) < \infty.$$

Soit $\Gamma_{\lambda, T}$ l'état de Gibbs de l'ensemble grand canonique et $Z_{\lambda}(T)$ sa fonction de répartition définis en (30). Alors

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{Z_{1/T}(T)}{Z_0(T)} = Z_r,$$

où Z_r est la fonction de partition non-linéaire relative définie en (39). De plus, la mesure de Gibbs μ définie en (40) est l'unique mesure de De Finetti de $(\Gamma_{1/T, T})$ à l'échelle $1/T$: c'est-à-dire

$$\lim_{n_j \rightarrow \infty} \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(\Gamma_{1/T, T} \mathbb{B}_{1/T}) = \int_{\mathcal{H}} b(u) d\mu(u)$$

pour tout $b \in C_b^0(V)$ pour tout sous-espace de dimension finie $V \subset \mathcal{H}$. $\mathbb{B}_{\epsilon_{n_j}}$ est l'anti-quantification de Wick définie en (33). De plus,

$$k!(\epsilon_{n_j}) \Gamma_{1/T, T}^{(k)} \longrightarrow \int_{\mathcal{H}} |u^{\otimes k}\rangle \langle u^{\otimes k}| d\mu(u)$$

fortement dans $\otimes_s^k \mathcal{H}$ pour $k \geq 1$.

5.4.4 Cas de la dimension finie

On se propose dans le cas de la dimension finie $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^d$ de montrer l'équivalence des fonctions de partitions quand $T \rightarrow \infty$ et quand $\lambda = 1/T$ (36). On fait l'hypothèse qu'il existe $C > 0$ tel que pour tout $T > 0$ $\text{Tr}(\mathcal{N}\Gamma) < C$ et $\text{Tr}(\mathcal{N}^2\Gamma) < C$ où $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^d a_i^* a_i$ est l'opérateur nombre de particules. Pour cela on montre d'abord que

$$Z(T) = \text{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H})}(e^{-\frac{\mathbb{H}}{T}\lambda}) \geq \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}(u)) du. \quad (41)$$

Puis, sachant que

$$-T \log Z(T) = \min_{\Gamma \geq 0, \text{Tr} \Gamma = 1} \{ \text{Tr}(\mathbb{H}\lambda\Gamma) + T \text{Tr} \Gamma \log \Gamma \}$$

et

$$-\log \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}(u)) du = \min_{\nu} \int_{\mathcal{H}} (\langle u|h|u \rangle + \frac{1}{2} \langle u \otimes^s u | w | u \otimes^s u \rangle) \nu(u) du + \int_{\mathcal{H}} \nu(u) \log \nu(u) du,$$

(atteint en $\mu_0(u) = Z^{-1} \exp(-\mathcal{E}(u))$) on montre que

$$\begin{aligned} \liminf_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{T}{\pi}\right)^{-d} \text{Tr}(\mathbb{H}\lambda\Gamma_T) + T \text{Tr} \Gamma_T \log \Gamma_T &\geq \int_{\mathcal{H}} (\langle u|h|u \rangle + \frac{1}{2} \langle u \otimes^s u | w | u \otimes^s u \rangle) \mu_0(u) du + \int_{\mathcal{H}} \mu_0(u) \log \mu_0(u) du \\ &\geq \int_{\mathcal{H}} \exp(-\mathcal{E}(u)) du. \end{aligned} \quad (42)$$

On remarque que \mathbb{H} et \mathbb{W} peuvent s'écrire

$$\mathbb{H}_0 = \sum_{i=1}^d \lambda_i a_i^* a_i, \quad (43)$$

$$\mathbb{W} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{i,j} a_i^* a_j^* a_i' a_j' \quad (44)$$

où $a_i^* = a^*(e_i)$, $a_i = a(e_i)$ où e_i est une base de diagonalisation de h ; $a_i'^* = a^*(f_i)$, $a_i' = a(f_i)$ où f_i est une base de diagonalisation de w .

On montre (41), pour cela on utilise la résolution de l'identité (31) avec les états cohérents et le Lemme 4.1 :

$$\text{Tr}(e^{-\frac{\mathbb{H}}{T}\lambda}) = \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \langle \xi(u\sqrt{T}) | e^{-\frac{\mathbb{H}}{T}\lambda} | \xi(u\sqrt{T}) \rangle du \geq \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \exp - \frac{\langle \xi(u\sqrt{T}) | \mathbb{H}_0 | \xi(u\sqrt{T}) \rangle}{T} du.$$

Or, grâce à (43) on a $\langle \xi(u\sqrt{T}) | \mathbb{H}_0 | \xi(u\sqrt{T}) \rangle = T \sum_{i=1}^d \lambda_i |u_i|^2 \|\xi(u\sqrt{T})\|^2 = \langle u|h|u \rangle$, car $a(e_i)\xi(u\sqrt{T}) = \langle e_i, u \rangle \xi(u\sqrt{T})$ et $\|\xi(u\sqrt{T})\| = 1$. De même, $\frac{\lambda}{T} \langle \xi(u\sqrt{T}) | \mathbb{W} | \xi(u\sqrt{T}) \rangle = \frac{1}{2} \langle u \otimes^s u | w | u \otimes^s u \rangle$ car $\lambda = 1/T$. Ce qui donne (41). Montrons (42). En utilisant encore une fois le Lemme 4.1, on a

$$\text{Tr}(\Gamma_T \log \Gamma_T) = \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \langle \xi(u\sqrt{T}) | \Gamma_T \log \Gamma_T | \xi(u\sqrt{T}) \rangle du \geq \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} s(\langle \xi(u\sqrt{T}) | \Gamma_T | \xi(u\sqrt{T}) \rangle) du$$

où $s(x) = x \log x$. Ensuite, toujours en utilisant (43) et (44), on réécrit

$$\text{Tr}(\mathbb{H}_0 \Gamma_T) = \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \langle \xi(u\sqrt{T}) | \mathbb{H}_0 \Gamma_T | \xi(u\sqrt{T}) \rangle du = \left(\frac{T}{\pi}\right)^d \int_{\mathcal{H}} \langle 0 | W^*(u\sqrt{T}) \mathbb{H}_0 W(u\sqrt{T}) W^*(u\sqrt{T}) \Gamma_T W(u\sqrt{T}) | 0 \rangle du$$

où $W(u\sqrt{T})$ est l'opérateur de Weyl défini dans la partie 5.3.1. On a (Propriété 5.1)

$$\begin{aligned} W^*(u\sqrt{T}) a_i^* a_i W(u\sqrt{T}) &= W^*(u\sqrt{T}) a_i^* W(u\sqrt{T}) W^*(u\sqrt{T}) a_i W(u\sqrt{T}) \\ &= (a_i^* + \sqrt{T} \bar{u}_i)(a_i + \sqrt{T} u_i) = T |u_i|^2 + \sqrt{T} u_i a_i^* + \sqrt{T} \bar{u}_i a_i + a_i^* a_i. \end{aligned}$$

D'où

$$\frac{1}{T} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{-d} \text{Tr}(\mathbb{H}_0 \Gamma_T) = \int_{\mathcal{H}} \langle u|h|u \rangle d\mu(\sqrt{T}u) + \sum_{i=1}^d \lambda_i \frac{1}{\sqrt{T}} \int_{\mathcal{H}} \bar{u}_i \langle 0|a_i W^*(u\sqrt{T}) \Gamma_T W(u\sqrt{T})|0 \rangle du$$

où $\mu(\sqrt{T}u) = \langle \xi(u\sqrt{T})|\Gamma_T|\xi(u\sqrt{T}) \rangle$ et on rappelle que $a_i|0\rangle = 0$. Le second terme se majore par $\frac{C}{\sqrt{T}} \text{Tr}(\mathcal{N}\Gamma_T) < \frac{C'}{\sqrt{T}}$. Le même calcul pour $\text{Tr}(\mathbb{W}\Gamma_T)$ donne

$$\begin{aligned} \frac{1}{T^2} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{-d} \text{Tr}(\mathbb{W}\Gamma_T) &= \int_{\mathcal{H}} \langle u \otimes^s u|w|u \otimes^s u \rangle d\mu(\sqrt{T}u) + \frac{1}{T} \sum_{i,j}^d \int_{\mathcal{H}} \langle 0|u_i u_j a_i a_j W^*(u\sqrt{T}) \Gamma_T W(u\sqrt{T})|0 \rangle du + \\ &\frac{1}{T^{3/2}} \sum_i^d \int_{\mathcal{H}} \langle 0|u_i a_i W^*(u\sqrt{T}) \Gamma_T W(u\sqrt{T})|0 \rangle du + \frac{1}{T^2} \sum_{i,j}^d \int_{\mathcal{H}} \langle 0|a_i a_j W^*(u\sqrt{T}) \Gamma_T W(u\sqrt{T})|0 \rangle du. \end{aligned}$$

Les trois derniers termes se majorent par $\frac{C}{T} \text{Tr}(\mathcal{N}^2 \Gamma_T) < \frac{C'}{T}$. On en conclut (42).

6 Appendice

6.1 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 [5]

Définition 6.1 (Opérateurs). *Un opérateur sur \mathcal{H} est une application linéaire A définie sur un sous-espace dense $D(A)$ de \mathcal{H} .*

Définition 6.2 (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 6.3 (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 équivallemment, si l'image de la sphère unité par A est compacte.*

Remarque 6.1. *Un opérateur compact est donc nécessairement borné.*

Définition 6.4 (Adjoint d'un opérateur). *L'adjoint d'un opérateur A est l'opérateur A^* de domaine $D(A^*) = \{y \in \mathcal{H} | x \mapsto \langle Ax, y \rangle \text{ est continue} \}$ 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 6.5 (Espace résolvant et spectre). *L'espace résolvant $\rho(A) \subset \mathbb{C}$ d'un opérateur A est l'ensemble $\rho(A) := \{z \in \mathbb{C}, (A - z) : D(A) \rightarrow \mathcal{H} \text{ est bijectif et de réciproque bornée} \}$. Le spectre de A est défini comme le complémentaire de l'espace résolvant $\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$.*

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 $(A - 1)V_k \rightarrow 0$ quand $k \rightarrow \infty$ et donc $\|(A - 1)^{-1}(A - 1)V_k\| / \|(A - 1)V_k\| \rightarrow \infty$ quand $k \rightarrow \infty$ ($(A - 1)^{-1}$ n'est pas borné).

Définition 6.6 (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 $\sigma_{\text{ess}}(A) := \sigma(A) \setminus \sigma_{\text{disc}}(A)$.*

Théorème 6.1 (Théorème spectral, Th 3 Section XII.2.2 de [4]). *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 $a : M \rightarrow \mathbb{R}$ et un opérateur unitaire $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d, d\mu)$ tel que UAU^* soit l'opérateur de multiplication par la fonction a sur $L^2(M, d\mu)$ de domaine*

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

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 6.1.

Théorème 6.2. *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 $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et $r_z(s) = (z - s)^{-1}$, alors $r_z(A) = (z - A)^{-1}$
- Si $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ et $\text{supp}(f) \subset \mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ alors $f(A) = 0$
- Si $f_n \nearrow f$, alors $f_n(A)x \rightarrow f(A)x$ pour tous $x \in \mathcal{H}$.

Théorème 6.3 (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 $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ 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 $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ fortement dans \mathcal{H} et $x_n \rightarrow 0$ 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 $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ fortement dans \mathcal{H} est précompacte (c'est-à-dire ayant une sous-suite convergente).

Démonstration. En utilisant le Théorème Spectral 6.1, 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 $\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \forall \epsilon > 0, \mu\{|a - \lambda| < \epsilon\} > 0\}$. Si $\lambda \in \sigma(A)$, on peut trouver $\|x_n\| = 1$ tel que $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ 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 $f_n \rightarrow \mathbb{1}_{\{a = \lambda\}}$ 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 6.4 (Théorème Min-Max, Th XIII.1 de [12]). *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 6.5 (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 $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = 0$ tels que*

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |x_n\rangle \langle x_n|. \quad (45)$$

Une manière de montrer ce résultat sans le Théorème spectral 6.1, celle de [12], 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 entraîne $M^{\perp} = \{0\}$ 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 6.3) 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 6.1 à (45). 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. \square

Du Théorème spectral pour les opérateurs autoadjoints compacts 6.5, 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 6.6 (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 $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n \geq \dots \geq 0$ telle que*

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k |y_n\rangle \langle x_n|. \quad (46)$$

Démonstration. Soit A un opérateur compact, l'opérateur A^*A est aussi compact et autoadjoint, il admet donc, d'après le Théorème 6.5 une décomposition du type (45), 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 (46). \square

Remarque 6.2. *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 6.7 (Théorème Min-Max pour les opérateurs compacts). *Soit A un opérateur compact autoadjoint, les valeurs singulières de A ordonnées par ordre décroissant $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n \geq \dots \geq 0$ 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 6.4 et le fait que les valeurs singulières de A sont les valeurs propres de l'opérateur $\sqrt{A^*A}$. \square

Remarque 6.3. Les notations des théorèmes 6.4 et 6.7 pour les valeurs singulières sont inversées.

Théorème 6.8 (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 une famille orthonormale complète de vecteurs propres (x_n) et des valeurs propres (λ_n) isolées de multiplicité finie associés à A vérifiant $\lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_n| = \infty$. On note

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

Démonstration. 1 \implies 4 : En utilisant le Théorème 6.5 on diagonalise $(A - z)^{-1} = \sum_{n \geq 1}^{\infty} \lambda_n |x_n\rangle \langle x_n|$, alors on a $A = \sum_{n \geq 1}^{\infty} (z + 1/\lambda_n) |x_n\rangle \langle x_n|$ et comme (λ_n) n'a que 0 comme point d'accumulation, on a bien $1 + 1/\lambda_n \rightarrow \infty$ quand $n \rightarrow \infty$.

4 \implies 3 et 2 : la forme (45) de A avec (λ_n) n'ayant pas de point d'accumulation et (x_n) étant une famille complète on peut 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 6.1

2 \implies 1 : Évident. \square

Définition 6.7 (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 6.9 (Weyl, Théorème 11.2.6 de [3]). *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 autoadjoint sur $D(A)$ et*

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

6.2 Quelques propriétés sur le laplacien et son spectre

6.2.1 Sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$

Théorème 6.10. *L'opérateur $-\Delta$ de domaine $H^2 \cap H_0^1$ est autoadjoint à résolvante compacte.*

Démonstration. $-\Delta + 1 : H^2 \cap H_0^1 \rightarrow L^2$ est une bijection, c'est une conséquence du Théorème de Lax-Milgram (Corollaire 5.8 de [1]), et son inverse est $(-\Delta + 1)^{-1} = 1 \times (-(i\nabla)^2 + 1)^{-1}$ qui est compact d'après le Théorème 2.9 (Kato-Seiler-Simon) (1 est intégrable puisque Ω est borné). Étant symétrique et borné, il est autoadjoint (son domaine est \mathcal{H}). $-\Delta$ est aussi autoadjoint. En effet, il est symétrique et si $y \in D(-\Delta^*)$ comme $(-\Delta + 1)$ est bijectif, il existe $x \in D(-\Delta)$ tel que $(-\Delta + 1)x = (-\Delta^* + 1)x = (-\Delta^* + 1)y$, mais $\ker(-\Delta^* + 1) = \overline{\text{Im}(-\Delta + 1)}^{\perp} = \{0\}$ donc $y = x \in D(-\Delta)$, donc $D(-\Delta) = D(-\Delta^*)$, c'est-à-dire $-\Delta$ est autoadjoint. \square

6.2.2 Opérateur de Schrödinger sur \mathbb{R}^d

L'opérateur de Schrödinger est l'opérateur $-\Delta + V$, V représente le potentiel auquel est soumis le système quantique. Lorsque $V \in L^p$, on peut énoncer certaines propriétés sur cet opérateur. En effet, les injections de Sobolev nous donne $H^2(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^q(\mathbb{R}^d)$ pour $2 \leq q \leq 2d/(d-4)$ quand $d \geq 5$, $2 \leq q < \infty$ quand $d = 4$ et $2 \leq q \leq \infty$ quand $d = 1, 2, 3$. Enfin, l'inégalité de Hölder nous donne $\|V\psi\|_{L^2} \leq \|V\|_{L^p} \|\psi\|_{L^q}$ pour $p^{-1} + q^{-1} = 2^{-1}$. Ainsi, la contrainte $V\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ pour $\psi \in H^2(\mathbb{R}^d)$ autorise p à vérifier : $\max(2, d/2) \leq p \leq \infty$ quand $d \neq 4$ et $2 < p \leq \infty$ quand $d = 4$. On a le résultat suivant.

Théorème 6.11. *Soit $V \in L^p$ avec p vérifiant (47). Alors l'opérateur $-\Delta + V$ de domaine H^2 est autoadjoint et $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = \mathbb{R}_+$.*

$$\begin{aligned} \max(2, d/2) < p \leq \infty \text{ quand } d \neq 4, \\ 2 < p \leq \infty \text{ quand } d = 4 \end{aligned} \tag{47}$$

Démonstration. $-\Delta$ est un opérateur autoadjoint de domaine H^2 , V est un opérateur symétrique et $D(-\Delta) \subset D(-\Delta + V)$ d'après la discussion précédente. Alors d'après l'inégalité de Kato-Seiler-Simon (Théorème 2.9) $V(-\Delta + i)^{-1} = V(x)((i\nabla)^2 + i)^{-1}$ est compact et est dans \mathcal{J}_p car $V(x), (p^2 + i)^{-1} \in L^p$. Ainsi, V est $-\Delta$ -compact et d'après le Théorème 6.9 $-\Delta + V$ est autoadjoint sur H^2 et $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = \sigma_{\text{ess}}(-\Delta) = \mathbb{R}_+$. \square

Si $V \in L^p$, $\|V1_{V>R}\|_p \rightarrow 0$ quand $R \rightarrow \infty$, donc d'après

Remarque 6.4. *En particulier, toutes les valeurs propres strictement négatives de $-\Delta + V$ sont de multiplicités finies et ne peuvent s'accumuler qu'en 0.*

6.3 Interpolation complexe d'espaces

Rappelons que l'on note $S = \{z \in \mathbb{C} \mid 0 \leq \text{Re}(z) \leq 1\}$. L'interpolation complexe repose sur le principe qu'une fonction sur S suffisamment régulière peut être contrôlée par ses valeurs sur le bord $\text{Re}(z) = 0$ et $\text{Re}(z) = 1$. C'est en particulier motivé par le lemme suivant.

Lemme 6.1 (Lemme des trois lignes d'Hadamard). *Si $\varphi : S \rightarrow \mathbb{C}$ est continue, bornée, analytique sur \mathring{S} et est telle que*

$$\begin{aligned} |\varphi(z)| &\leq M_0 \text{ si } \text{Re}(z) = 0, \\ |\varphi(z)| &\leq M_1 \text{ si } \text{Re}(z) = 1. \end{aligned}$$

Alors pour tout $z \in S$ on a aussi $|\varphi(z)| \leq M_0^{1-\text{Re}(z)} M_1^{\text{Re}(z)}$.

Définition 6.8 (Consistance). *Soit X un espace vectoriel complexe et $\|\cdot\|_0, \|\cdot\|_1$ deux normes sur X . On dit que ces deux normes sont consistantes si pour toute suite (x_n) qui converge vers 0 pour une des deux normes et est de Cauchy pour l'autre, elle converge vers 0 pour les deux normes.*

Si $\|\cdot\|_0$ et $\|\cdot\|_1$ sont consistantes, on définit alors

$$\|x\|_+ = \inf \{ \|y\|_0 + \|z\|_1 \mid x = y + z \}.$$

Cela définit bien une norme et l'on note X_0, X_1, X_+ les complétions de X pour les normes $\|\cdot\|_0, \|\cdot\|_1$ et $\|\cdot\|_+$. Munissons nous d'un espace vectoriel X ainsi que de deux normes $\|\cdot\|_0, \|\cdot\|_1$ consistantes. Il est possible de vérifier que $id : X \rightarrow X_+$ se prolonge de manière injective par continuité sur X_0 et X_1 , on peut donc voir X_0 et X_1 comme des sous-espaces de X_+ . Définissons alors $\mathcal{F}(X)$ comme l'espace des fonctions $f : S \rightarrow X_+$ continues qui sont analytiques sur l'intérieur \mathring{S} et qui vérifient

- $f(z) \in X_0$ si $\text{Re}(z) = 0$ et $t \mapsto f(it)$ est continue pour $\|\cdot\|_0$; $f(z) \in X_1$ si $\text{Re}(z) = 1$ et $t \mapsto f(1 + it)$ est continue pour $\|\cdot\|_1$
- $\sup_{z \in S} \|f(z)\|_+ < \infty$
- $\|f\| = \sup_{t \in \mathbb{R}} \{ \|f(it)\|_0, \|f(1 + it)\|_1 \} < \infty$ (définition).

Proposition 6.1. - $\mathcal{F}(X)$ est un espace de Banach pour la norme $\|f\|$.

- Pour tout $t \in]0; 1[$, l'espace $K_t = \{f \in \mathcal{F}(X) \mid f(t) = 0\}$ est fermé pour la norme $\|f\|$.

On peut alors définir $\tilde{X}_t = \mathcal{F}(X) \setminus K_t$ pour $0 \leq t \leq 1$ ainsi que la norme quotient

$$\|f\|_{(t)} = \inf \{ \|g\| \mid g \in \mathcal{F}(X) \mid g(t) = f(t) \} \tag{48}$$

Et on a les injections continues suivantes $X \rightarrow \tilde{X}_t$ et $\tilde{X}_t \rightarrow X_+$ en identifiant les classes de fonctions de \tilde{X}_t avec leur valeur en t . Définissons X_t comme la complétion de X par rapport à $\|\cdot\|_{(t)}$. Remarquons alors que

cette notation est compatible en $t = 0$ et $t = 1$. En effet, montrons que $\|\cdot\|_{(0)}$ coïncide avec la norme initiale $\|\cdot\|_0$ sur X . Pour $x \in X$ et $f \in \mathcal{F}(X)$, $f(0) = x$ on a bien

$$\|x\|_0 \leq \sup_{t \in \mathbb{R}} \{ \|f(it)\|_0, \|f(1+it)\|_1 \} = \|f\|, \text{ donc}$$

$$\|x\|_0 \leq \inf \{ \|f\| \mid f(0) = x \} = \|[f]\|_{(0)} = \|x\|_{(0)}.$$

Et réciproquement, en posant $f_c(z) = e^{cz}x$ pour $c > 0$ on a bien $\|[f_c]\|_{(0)} = \|x\|_0$ et avec c suffisamment grand on a $\|f_c\| = \sup_{t \in \mathbb{R}} \|f_c(it)\|_0$ et donc l'infimum est atteint et on a égalité des normes. La même démonstration permet également de conclure que $\|\cdot\|_1$ et $\|\cdot\|_{(1)}$ coïncident. Les espaces X_t sont appelés *espaces d'interpolation* tandis que X_0 et X_1 sont appelés *espaces interpolés*.

Théorème 6.12 (Calderon-Lions). *Soient X et Y deux espaces vectoriels complexes ainsi que $\|\cdot\|_X^0, \|\cdot\|_X^1$ et $\|\cdot\|_Y^0, \|\cdot\|_Y^1$ deux couples de normes consistantes sur X et Y . Et soit $T : S \rightarrow \mathcal{L}(X_+, Y_+)$ analytique, continue et uniformément bornée sur la bande S vérifiant :*

- $T(t)[X] \subset Y$ pour tout $t \in]0; 1[$
- Pour tout $y \in \mathbb{R}$, $T(iy) \in \mathcal{L}(X_0, Y_0)$ et $M_0 = \sup_{y \in \mathbb{R}} \|T(iy)\|_{\mathcal{L}(X_0, Y_0)} < \infty$
- Pour tout $y \in \mathbb{R}$, $T(1+iy) \in \mathcal{L}(X_1, Y_1)$ et $M_1 = \sup_{y \in \mathbb{R}} \|T(1+iy)\|_{\mathcal{L}(X_1, Y_1)} < \infty$.

Alors pour tout $t \in]0; 1[: T(t)[X_t] \subset Y_t$ et $\|T(t)\|_{\mathcal{L}(X_t, Y_t)} \leq M_0^{1-t} M_1^t$.

Il se trouve que l'interpolation des espaces de Lebesgue est compatible avec les notations habituelles au sens suivant. Si (M, μ) est un espace mesuré σ -fini et $1 \leq p_0 < p_1 \leq \infty$, $X = L^{p_0} \cap L^{p_1}$, $\|\cdot\|_{p_0}, \|\cdot\|_{p_1}$ les normes usuelles, alors $X_t = L^{p_t}$ avec $p_t^{-1} = tp_1^{-1} + (1-t)p_0^{-1}$, sauf si $p_1 = \infty$ et $t = 1$ auquel cas X_1 est la fermeture de X pour $\|\cdot\|_\infty$ qui n'est pas nécessairement L^∞ . C'est en particulier le cas pour ce qui nous intéresse, c'est-à-dire quand la mesure μ est discrète. X_1 est alors l'ensemble des suites qui tendent vers 0. Le lecteur pourra se référer à l'exemple 1 de l'appendice de la section IX.4 de [11]

7 Remerciements

Je tiens à remercier mon directeur de stage M. Lewin pour m'avoir fait découvrir ce merveilleux domaine que forment l'analyse fonctionnelle et la mécanique quantique, ainsi que pour la disponibilité qu'il m'a accordée et la pédagogie dont il a fait preuve. Ce stage, une fois encore, a été une expérience très enrichissante autant qu'agréable. Je remercie aussi l'université de Cergy-Pontoise et l'université Paris-Dauphine pour m'avoir accueilli.

Références

- [1] H. BREZIS, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, universi-text ed., 2010.
- [2] M. COMBESURE AND D. ROBERT, *Coherent States and Applications in Mathematical Physics*, Theoretical and Mathematical Physics, Springer, 2012.
- [3] E. B. DAVIES, *Linear operators and their spectra*, vol. 106 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [4] 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.
- [5] M. LEWIN, *Variational Methods in Quantum Mechanics*. Lecture notes (University of Cergy-Pontoise), 2010.
- [6] M. LEWIN, P. T. NAM, AND N. ROUGERIE, *Derivation of Hartree's theory for generic mean-field Bose gases*, preprint arXiv, (2013). preprint arXiv.
- [7] ———, *Derivation of nonlinear Gibbs measures from many-body quantum mechanics*, en préparation, (2014).
- [8] E. H. LIEB AND M. LOSS, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2001.
- [9] E. H. LIEB AND R. SEIRINGER, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, Cambridge Univ. Press, 2010.
- [10] M. REED AND B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional analysis*, Academic Press, 1972.
- [11] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier analysis, self-adjointness*, Academic Press, New York, 1975.
- [12] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York, 1978.
- [13] B. SIMON, *Trace ideals and their applications*, vol. 35 of London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, Cambridge, 1979.
- [14] A. TRIAY, *Mémoire de stage L3 - Condensation de Bose-Einstein*, (2013).