

**ÉQUATIONS DE CHAMP MOYEN POUR LA DYNAMIQUE
QUANTIQUE D'UN GRAND NOMBRE DE PARTICULES**
[d'après Bardos, Erdős, Golse, Gottlieb, Mauser, Yau]

par **Patrick GÉRARD**

INTRODUCTION

Considérons N particules quantiques dans l'espace \mathbf{R}^3 , interagissant deux à deux selon un potentiel V fonction de la distance r entre les deux particules. L'exemple le plus courant est le potentiel coulombien

$$(1) \quad V(r) = \frac{C}{r},$$

où la constante C ci-dessus est positive dans le cas d'une interaction répulsive (par exemple entre charges de même signe), et négative dans le cas d'une interaction attractive (par exemple gravitationnelle). Après adimensionnement des constantes, le hamiltonien quantique associé est l'opérateur différentiel

$$(2) \quad H_N = - \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{1 \leq j < k \leq N} V(|x_j - x_k|)$$

où Δ_j désigne l'opérateur de Laplace agissant sur la j -ième position x_j . Le système est alors décrit à l'instant t par sa fonction d'onde $\Psi_N(t) \in L^2(\mathbf{R}^{3N})$ selon l'équation de Schrödinger

$$(3) \quad i \frac{\partial \Psi_N}{\partial t} = H_N \Psi_N, \quad \Psi_N(0) = \Psi_{N,0}.$$

Le fait que ce problème de Cauchy soit bien posé pour tout élément $\Psi_{N,0}$ de $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ fait l'objet d'un théorème démontré par Kato en 1951. Pour l'énoncer, rappelons quelques notations. Pour tout entier naturel d , on désigne par $C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$ l'espace des fonctions de classe C^∞ à support compact sur \mathbf{R}^d . Si m est un entier naturel, on introduit l'espace de Sobolev

$$H^m(\mathbf{R}^d) = \{u \in L^2(\mathbf{R}^d) \mid \forall \alpha \in \mathbf{N}^d, |\alpha| \leq m, \partial^\alpha u \in L^2(\mathbf{R}^d)\},$$

les dérivées étant définies au sens des distributions.

THÉORÈME 0.1 (Kato [19], 1951). — *On suppose que la fonction $x \mapsto V(|x|)$ est à valeurs réelles et appartient à $L^2(\mathbf{R}^3) + L^\infty(\mathbf{R}^3)$. L'opérateur $H_N : C_0^\infty(\mathbf{R}^{3N}) \rightarrow L^2(\mathbf{R}^{3N})$ admet une unique extension autoadjointe. Son domaine est l'espace de Sobolev $H^2(\mathbf{R}^{3N})$.*

On note encore H_N l'opérateur autoadjoint ainsi défini. En considérant le groupe à un paramètre unitaire $\exp(-itH_N)$ engendré par H_N grâce au théorème de Stone (*cf.* par exemple [25]), on en déduit :

COROLLAIRE 0.2. — *Sous les hypothèses du théorème 0.1, soit $\Psi_{N,0} \in L^2(\mathbf{R}^{3N})$. Il existe une unique solution $\Psi_N \in C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^{3N}))$ au problème de Cauchy (3), l'équation aux dérivées partielles étant satisfaite au sens des distributions dans $\mathbf{R} \times \mathbf{R}^{3N}$.*

Dans le résultat ci-dessus, le caractère unitaire de l'évolution équivaut à la loi de conservation

$$(4) \quad \|\Psi_N(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^{3N})} = \|\Psi_{N,0}\|_{L^2(\mathbf{R}^{3N})}$$

tandis que la conservation de l'énergie est traduite par la continuité de l'opérateur $\exp(-itH_N)$ sur $H^1(\mathbf{R}^{3N})$ et par le fait que la quantité

$$(5) \quad E_N = \int_{\mathbf{R}^{3N}} |\nabla_X \Psi_N(t, X)|^2 dX + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \int_{\mathbf{R}^{3N}} V(|x_j - x_k|) |\Psi_N(t, X)|^2 dX$$

reste constante au cours du temps. Dans la formule ci-dessus, on a noté $X = (x_1, \dots, x_N)$ le point courant de \mathbf{R}^{3N} .

Un problème fondamental en physique mathématique consiste à décrire cette évolution lorsque N tend vers l'infini. Précisons ce que l'on entend par là. Tout d'abord, afin d'assurer que la force exercée sur chaque particule reste bornée, il convient de normaliser le potentiel V en imposant

$$(6) \quad V(r) = \frac{1}{N} V_1(r)$$

où V_1 est un potentiel indépendant de N . Il faut ensuite préciser la notion de convergence utilisée pour étudier, à chaque instant t , une suite $(\Psi_N(t))$ de fonctions dont le nombre de variables tend vers l'infini avec N . Dans ce but, rappelons que, selon les principes de la mécanique quantique (*cf.* par exemple [29]), la fonction d'onde Ψ_N est de norme 1 dans L^2 , et les quantités physiques sont évaluées dans l'état Ψ_N par des expressions du type

$$\langle A \rangle_{\Psi_N} = \langle \Psi_N | A \Psi_N \rangle_{L^2},$$

où A est un opérateur (éventuellement non borné) sur L^2 (le produit scalaire est ici supposé linéaire par rapport au deuxième vecteur). Par exemple, l'énergie (5) du système n'est autre que la quantité $E_N = \langle H_N \rangle_{\Psi_N}$. On constate que toutes ces quantités ne dépendent de Ψ_N qu'à travers l'opérateur de projection orthogonale sur la droite engendrée par Ψ_N ,

$$\rho_N = |\Psi_N\rangle \langle \Psi_N|$$

ou encore l'opérateur de noyau

$$\rho_N(X, Y) = \Psi_N(X) \overline{\Psi_N(Y)}.$$

Nous allons nous restreindre à des opérateurs A bornés n'agissant que sur un nombre fixe k de variables, de sorte que, pour tout $N \geq k$,

$$\langle A \rangle_{\Psi_N} = \text{Tr}(A\rho_{N:k})$$

où $\rho_{N:k}$ est l'opérateur sur $L^2(\mathbf{R}^{3k})$ de noyau

$$(7) \quad \rho_{N:k}(x_1, \dots, x_k; y_1, \dots, y_k) = \int_{\mathbf{R}^{3(N-k)}} \Psi_N(x_1, \dots, x_k, Z) \overline{\Psi_N(y_1, \dots, y_k, Z)} dZ.$$

Compte tenu des hypothèses sur Ψ_N , $\rho_{N:k}$ est un opérateur positif à trace sur $L^2(\mathbf{R}^{3k})$, de trace égale à 1. La suite $(\rho_{N:k})_{N \geq 1}$ admet donc une valeur d'adhérence $\rho^{(k)}$ pour la topologie faible $\sigma(\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k})), \mathcal{K}(L^2(\mathbf{R}^{3k})))$ issue de la dualité entre opérateurs à trace et opérateurs compacts. En d'autres termes, il existe une sous-suite $(\rho_{N_n:k})$ et un opérateur $\rho^{(k)} \in \mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k}))$ tels que, pour tout opérateur compact A sur $L^2(\mathbf{R}^{3k})$,

$$\text{Tr}(A\rho_{N_n:k}) \longrightarrow \text{Tr}(A\rho^{(k)}).$$

Un argument d'extraction diagonale assure ainsi l'existence d'une suite $(\rho^{(k)})_{k \geq 1}$. En supposant qu'un tel procédé puisse être réalisé pour tout temps t (ce qui est le cas grâce à un peu d'équicontinuité), une question naturelle est bien sûr de décrire l'évolution d'une telle suite $(\rho^{(k)}(t))$.

La réponse à cette question dépend beaucoup de la donnée initiale $\Psi_{N,0}$. On distingue à ce sujet deux types de particules, correspondant à des propriétés différentes des fonctions d'onde.

a) *Les bosons* : leurs fonctions d'onde sont symétriques en les variables (x_1, \dots, x_N) : pour toute permutation σ de $\{1, \dots, N\}$,

$$\Psi_N(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) = \Psi_N(x_1, \dots, x_N).$$

Cette propriété est conservée par le flot $\exp(-itH_N)$. Un exemple typique de donnée initiale qui la vérifie est

$$(8) \quad \Psi_{N,0}(x_1, \dots, x_N) = \psi_0(x_1) \dots \psi_0(x_N) = \psi_0^{\otimes N}(x_1, \dots, x_N),$$

où ψ_0 est un élément de $L^2(\mathbf{R}^3)$, de norme 1. La présence du potentiel d'interaction V_1 s'oppose à ce que la structure de produit tensoriel (8) soit conservée par l'évolution. L'objet des travaux présentés ici est de montrer que, sous des hypothèses raisonnables sur ψ_0 et sur V_1 , cette structure réapparaît après le passage à la limite décrit ci-dessus, au sens où il existe, pour tout t , un élément $\psi(t)$ de $L^2(\mathbf{R}^3)$ tel que, pour tout $k \geq 1$,

$$\rho^{(k)}(t, x_1, \dots, x_k; y_1, \dots, y_k) = \psi(t, x_1) \dots \psi(t, x_k) \overline{\psi(t, y_1)} \dots \overline{\psi(t, y_k)}.$$

De plus, l'évolution de $\psi(t)$ est décrite par une équation aux dérivées partielles non linéaire, appelée équation de Hartree.

b) *Les fermions* : leurs fonctions d'onde sont antisymétriques en les variables (x_1, \dots, x_N) : pour toute permutation σ de $\{1, \dots, N\}$,

$$\Psi_N(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) = \varepsilon(\sigma) \Psi_N(x_1, \dots, x_N).$$

Là encore, cette propriété est conservée par le flot $\exp(-itH_N)$. Un exemple typique de donnée initiale qui la vérifie est un « déterminant de Slater » (cf. [26])

$$(9) \quad \Psi_{N,0}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_{j,0}(x_l))_{1 \leq j, l \leq N},$$

où $(\psi_{j,0})_{1 \leq j \leq N}$ est un système orthonormé de $L^2(\mathbf{R}^3)$. Là encore, une telle structure n'est pas conservée par l'évolution. De plus, si l'on se donne un système orthonormé $(\psi_{j,0})_{j \geq 1}$ de $L^2(\mathbf{R}^3)$, on montre que, pour tout $k \geq 1$, $\rho_{N:k}(t)$ tend vers 0 pour la topologie faible $\sigma(\mathcal{L}^1, \mathcal{K})$. Néanmoins, sous des hypothèses supplémentaires sur ce système, il existe, pour tout t et pour tout N , un système orthonormé $(\psi_j(t))_{1 \leq j \leq N}$ de $L^2(\mathbf{R}^3)$ dont le déterminant de Slater $\Psi_N^S(t)$ approche bien la dynamique des N corps au sens suivant : si $\rho_N^S(t)$ désigne le projecteur orthogonal sur $\Psi_N^S(t)$, alors, pour tout k , pour tout t ,

$$\mathrm{Tr}(|\rho_{N:k}(t) - \rho_{N:k}^S(t)|) \longrightarrow 0$$

quand N tend vers l'infini. Enfin, pour chaque N , le repère mobile $(\psi_j(t))_{1 \leq j \leq N}$ évolue dans $L^2(\mathbf{R}^3)$ selon un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires, appelé système de Hartree–Fock.

Dans les deux cas décrits ci-dessus, on a donc réduit la dynamique d'un grand nombre de particules à des équations non linéaires « modèles » sur des fonctions de trois variables. La suite de cet exposé est consacrée à la description de ces équations, ainsi qu'aux résultats de convergence correspondants.

Remarque 0.3. — Un cas particulier important de la dynamique à N corps est bien sûr l'étude des fonctions propres (états liés) et des valeurs propres de l'opérateur H_N , en particulier son état fondamental. Nous n'aborderons pas ici l'abondante littérature consacrée à cette question, qui justifierait largement un autre exposé, et renvoyons à l'article de revue de Lieb [20], à l'ouvrage de Catto–Le Bris–Lions [8], ou au cours donné cette année par P.–L. Lions au Collège de France.

Remerciements. — Je remercie C. Bardos et F. Golse pour les discussions que nous avons eues sur les travaux présentés dans cet exposé, et pour m'avoir transmis le manuscrit [5]. Je suis reconnaissant à C. Gérard de m'avoir aidé à comprendre les résultats de [14].

1. LE CAS DES BOSONS : ÉNONCÉ DU RÉSULTAT

1.1. Hypothèses sur le potentiel

Dans ce paragraphe et le suivant, on désigne par V_1 une fonction de classe C^∞ de $]0, +\infty[$ dans \mathbf{R} , vérifiant les estimations suivantes : pour tout $m \in \mathbf{N}$, il existe une constante $C_m > 0$ telle que

$$(10) \quad \forall r \in]0, r_1], |V_1^{(m)}(r)| \leq \frac{C_m}{r^{m+1}}.$$

Il est clair que $V = V_1/N$ satisfait aux hypothèses du théorème 0.1.

1.2. L'équation de Hartree

Soit ψ_0 une fonction de $H^1(\mathbf{R}^3)$, de norme L^2 égale à 1, et soit $\Psi_{N,0}$ la fonction d'ondes $\psi_0^{\otimes N}$ qui lui est associée par (8). L'énergie totale E_N du système, donnée par (5), vérifie, compte tenu de la normalisation (6), lorsque N tend vers l'infini :

$$\frac{E_N}{N} \longrightarrow \int_{\mathbf{R}^3} |\nabla \psi_0(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3} V_1(|x-y|) |\psi_0(x)|^2 |\psi_0(y)|^2 dx dy.$$

Le second membre de l'identité ci-dessus est une fonction régulière de $\psi_0 \in H^1(\mathbf{R}^3)$, et, en utilisant la forme symplectique

$$\sigma(f, g) = 2 \operatorname{Im} \langle f | g \rangle_{L^2}$$

sur $L^2(\mathbf{R}^3)$, on lui associe un champ hamiltonien dont les courbes intégrales sont les solutions de

$$(11) \quad i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\Delta \psi + W \psi, \quad W(t, x) = \int_{\mathbf{R}^3} V_1(|x-y|) |\psi(t, y)|^2 dy.$$

L'équation (11) est l'équation de Hartree (cf. [17], où le contexte est plutôt celui des fonctions propres). Dans le cas où $V_1(r) = C/r$, le potentiel W est donné par l'équation de Poisson $-\Delta W = 4\pi C |\psi|^2$, de sorte que (11) est également connue sous le nom de système de Schrödinger–Poisson. Le problème de Cauchy pour (11) a été étudié en détail par Ginibre–Velo dans [15], dont nous citons le résultat suivant.

THÉORÈME 1.1 ([15], 1980). — *Pour tout entier $m \geq 1$, pour toute donnée initiale ψ_0 appartenant à $H^m(\mathbf{R}^3)$, il existe une unique solution $\psi \in C(\mathbf{R}, H^m(\mathbf{R}^3))$ de l'équation (11) vérifiant $\psi(0) = \psi_0$.*

Dans le cadre du théorème ci-dessus, on a de plus les lois de conservation

$$\|\psi(t)\|_{L^2} = \text{cste},$$

$$\int_{\mathbf{R}^3} |\nabla \psi(t, x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3} V_1(|x-y|) |\psi(t, x)|^2 |\psi(t, y)|^2 dx dy = \text{cste}.$$