Séminaire BOURBAKI Mars 2024
75e année, 2023–2024, nº 1222, p. 467 à 507
doi : 10.24033/ast.1239

MESURES DE GIBBS NON LINÉAIRES ET LIMITES DE CHAMP MOYEN POUR LES SYSTÈMES QUANTIQUES
[*d'après* Lewin, Nam et Rougerie]

par **Simona Rota Nodari**

Introduction

Une *mesure de Gibbs non linéaire* est une mesure de probabilité en dimension infinie de la forme

$$d\mu(u) = \frac{e^{-\mathscr{D}[u]}}{z} d\mu_0(u) \tag{1}$$

avec z un facteur de normalisation, μ_0 une *mesure gaussienne de covariance* $(-\Delta + V_0)^{-1}$ et $\mathscr{D}$ une fonction positive non quadratique. La définition précise de cette mesure sera discutée dans la section suivante, mais, au moins formellement, nous pouvons voir une mesure de Gibbs non linéaire comme la mesure définie par

$$d\mu(u) = \frac{e^{-\mathscr{E}(u)}}{Z_0 z}\, du$$

avec

$$\mathscr{E}(u) = \int_{\mathbb{R}^d} (|\nabla u|^2 + V_0|u|^2)\, dx + \int_{\mathbb{R}^d} \mathscr{D}[u]\, dx \tag{2}$$

et Z_0 le facteur de normalisation de la mesure gaussienne $d\mu_0$.

Les mesures de Gibbs non linéaires jouent un rôle central dans de nombreux domaines des mathématiques. Elles ont été définies dans les années 60/70 dans le cadre de la théorie constructive des champs quantiques. Plus récemment, elles ont été utilisées pour l'analyse d'équations aux dérivées partielles non linéaires avec données initiales aléatoires ou d'équations aux dérivées partielles stochastiques. Finalement, elles apparaissent en mécanique quantique statistique dans la description du comportement d'un système avec un grand nombre de particules près d'une transition de phase.

Les résultats que nous discutons dans ce texte, dus à Lewin, Nam et Rougerie (2015, 2021), s'inscrivent dans cette dernière thématique. Plus précisément, d'un point de vue physique, nous nous intéressons à la formation d'un condensat de Bose–Einstein juste avant sa transition de phase. D'un point de vue mathématique, nous présentons l'émergence des mesures de Gibbs non linéaires (1) à partir des états de Gibbs (bosoniques) d'un problème linéaire à plusieurs particules dans une limite de type champ moyen.

Un système quantique de n bosons confinés par un potentiel $V\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tel que $\lim_{x\to\infty} V(x) = +\infty$, et qui interagissent via un potentiel $w\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ est décrit par un opérateur de Schrödinger de la forme

$$H_{\lambda,\nu,n} = \sum_{j=1}^{n} (-\Delta_{x_j} + V(x_j) - \nu) + \lambda \sum_{1\leqslant j<k\leqslant n} w(x_i - x_j). \tag{3}$$

Cet opérateur agit sur $\bigotimes_s^n L^2(\mathbb{R}^d)$, *i.e.* sur $L_s^2((\mathbb{R}^d)^n)$ le sous-espace de $L^2((\mathbb{R}^d)^n)$ contenant les fonctions symétriques par rapport aux permutations de leurs variables. Le paramètre λ est une *constante de couplage* qui sera utilisée pour modifier l'intensité de l'interaction tandis que ν est le *potentiel chimique* qui jouera un rôle crucial lorsqu'il sera nécessaire de renormaliser la théorie.

Dans le formalisme grand-canonique où le nombre de particules n'est pas fixé, la *fonction de partition* de ce système à température $T > 0$ est donnée par

$$\mathscr{Z}(\lambda,\nu,T) = 1 + \sum_{n\geqslant 1} \mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{H_{\lambda,\nu,n}}{T}}\right]. \tag{4}$$

Dans ce texte, nous nous intéressons au régime

$$T = \frac{1}{\lambda} \text{ avec } \lambda \to 0^+,$$

où le nombre moyen de particules, donné par

$$\mathscr{Z}(\lambda,\nu,\tfrac{1}{\lambda})^{-1} \sum_{n\geqslant 1} n\mathrm{Tr}\left[e^{-\lambda H_{\lambda,\nu,n}}\right],$$

diverge. Ce régime correspond à une limite de type *champ moyen*.

Le résultat que nous souhaitons présenter affirme que, pour une fonction $\nu = \nu(\lambda)$ bien choisie, nous avons le développement suivant de la fonction de partition

$$\log \mathscr{Z}(\lambda,\nu(\lambda)) = \log \mathscr{Z}_0(\lambda,\nu(\lambda)) + \log z + o(1)_{\lambda\to 0^+} \tag{5}$$

avec $\mathscr{Z}(\lambda,\nu(\lambda)) = \mathscr{Z}(\lambda,\nu(\lambda),\frac{1}{\lambda})$. Ici, le terme $\log \mathscr{Z}_0(\lambda,\nu)$ est donné par la *théorie de champ moyen*. Dans ce contexte, cela correspond à restreindre le problème à la famille des états de Gibbs quasi-libres. Par la suite, nous verrons que le choix de l'état quasi-libre de référence dépend de la dimension d et de la nécessité d'utiliser une procédure de renormalisation pour $d = 2, 3$.

L'ordre suivant dans (5) fait intervenir la mesure de Gibbs non linéaire via sa constante de normalisation $z = \int e^{-\mathscr{D}[u]}\, d\mu_0(u)$.

Par conséquent, le développement (5) établit bien la validité de la théorie du champ moyen au premier ordre, ainsi que les fluctuations autour de celui-ci impliquant la mesure de Gibbs non linéaire μ.

Dans la section 1, nous allons décrire le modèle quantique considéré ainsi que la construction des mesures de Gibbs non linéaires en dimension $d \leqslant 3$. La section 2 est dédiée à la présentation des résultats concernant l'apparition des mesures de Gibbs non linéaires dans une limite de champ moyen à température positive. Finalement, dans la section 3, nous présentons une partie des éléments de preuve des résultats énoncés.

Ce texte est inspiré par les travaux originaux de Lewin, Nam et Rougerie (2015, 2021), mais aussi par les articles de synthèse de Lewin (2023) et Rougerie (2016, 2019).

1. Contexte et définitions

Dans cette section, nous introduisons le formalisme nécessaire pour énoncer les résultats qui nous intéressent concernant les limites de champ moyen pour les systèmes quantiques.

En particulier, pour le modèle quantique à plusieurs particules, le formalisme grand-canonique, basé sur les espaces de Fock, est utilisé et le nombre de particules n'est pas fixé. Pour le modèle classique, nous passons en revue la construction des mesures gaussiennes et nous introduisons la notion de mesure de Gibbs non linéaire.

1.1. Modèle quantique et états de Gibbs

Soit $\mathfrak{H}$ un espace de Hilbert séparable. Dans ce texte, nous considérons $\mathfrak{H} = L^2(\Omega)$ avec $\Omega = \mathbb{R}^d$. L'*espace de Fock bosonique* est donné par

$$\mathfrak{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \bigotimes_s^n \mathfrak{H} = \mathbb{C} \oplus \mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H} \otimes_s \mathfrak{H} \oplus \cdots \tag{6}$$

où $\bigotimes_s^n \mathfrak{H}$ est le produit tensoriel symétrique de n copies de $\mathfrak{H}$. Dans notre cadre $\bigotimes_s^n \mathfrak{H}$ est le sous-espace de $L^2((\mathbb{R}^d)^n)$ qui contient les fonctions symétriques par rapport à l'échange de deux variables ce qui est approprié pour décrire une configuration de n bosons.

Autrement dit, l'espace de Fock bosonique est l'espace qui contient les suites de la forme $\Psi = (\psi^0, \psi^1, \psi^2, \dots) \in \mathbb{C} \times \mathfrak{H} \times \mathfrak{H} \otimes_s \mathfrak{H} \times \cdots$ telles que

$$\|\Psi\|^2_{\mathfrak{F}} = \sum_{n \geqslant 0} \|\psi^n\|^2_{\otimes_s^n \mathfrak{H}} < \infty.$$

Il s'agit d'un espace de Hilbert muni du produit scalaire

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle_{\mathfrak{F}} = \sum_{n \geqslant 0} \langle \Psi_1^n, \Psi_2^n \rangle_{\otimes_s^n \mathfrak{H}}.$$

Par convention, le *vide* est défini par $|0\rangle := (1, 0, 0, \dots) \in \mathfrak{F}$.

Les opérateurs qui agissent sur un espace avec un nombre fini de particules peuvent être étendus à l'espace de Fock via la *seconde quantification*. Plus précisément, soit A_k un opérateur auto-adjoint sur $\otimes_s^k \mathfrak{H}$. On définit son action sur $\mathfrak{F}$ par

$$\mathbb{A}_k := 0 \oplus \ldots \oplus \bigoplus_{n=k}^{\infty} \left(\sum_{1 \leqslant i_1 < \ldots < i_k \leqslant n} (A_k)_{i_1, \dots, i_k} \right), \tag{7}$$

où $(A_k)_{i_1,\dots,i_k}$ désigne l'action de A_k sur les variables indexés par $i_1, \dots, i_k$ dans $\otimes_s^n \mathfrak{H}$. Par définition, on notera

$$A_k \otimes_s \mathbb{1}_{n-k} = \binom{n}{k}^{-1} \sum_{1 \leqslant i_1 < \ldots < i_k \leqslant n} (A_k)_{i_1, \dots, i_k}.$$

Pour les opérateurs à un corps, *i.e.* $k = 1$, on utilise la notation

$$\mathrm{d}\Gamma(A) := \mathbb{A} = 0 \oplus \bigoplus_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{1 \leqslant i \leqslant n} (A)_i \right) \tag{8}$$

Un exemple important d'opérateur à un corps est donné par l'opérateur *nombre total de particules*. Plus précisément, il s'agit de la seconde quantification de l'opérateur identité sur $\mathfrak{H}$, *i.e.*

$$\mathscr{N} = \mathrm{d}\Gamma(\mathbb{1}_{\mathfrak{H}}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} n \mathbb{1}_{\otimes_s^n \mathfrak{H}}. \tag{9}$$

Soit $\Psi \in \mathfrak{F}$ tel que $\|\Psi\|_{\mathfrak{F}} = 1$. L'*état pur* associé à Ψ est le projecteur orthogonal sur Ψ, noté $|\Psi\rangle \langle \Psi|$. Un *état mixte* Γ est par définition une superposition statistique d'états purs, *i.e.* une combinaison convexe éventuellement infinie de projecteurs orthogonaux qui commutent 2 à 2. En utilisant le théorème spectral, il est clair que l'ensemble des états mixtes, noté $\mathscr{S}$, est donné par l'ensemble des opérateurs positifs de trace 1 :

$$\mathscr{S}(\mathfrak{F}) = \{\Gamma \text{ opérateur auto-adjoint sur } \mathfrak{F},\ \Gamma \geqslant 0, \mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\Gamma] = 1\}. \tag{10}$$

Étant donné un état mixte $\Gamma \in \mathscr{S}(\mathfrak{F})$, on appelle *k-ième matrice de densité réduite* de Γ, notée $\Gamma^{(k)}$, l'opérateur sur $\otimes_s^k \mathfrak{H}$ défini par dualité via

$$\mathrm{Tr}_{\otimes_s^k \mathfrak{H}}[A_k \Gamma^{(k)}] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathbb{A}_k \Gamma] \tag{11}$$

pour tout opérateur borné A_k sur $\otimes_s^k \mathfrak{H}$ et avec $\mathbb{A}_k$ la seconde quantification de A_k. Cela implique en particulier que le nombre de particules d'un état Γ est donné par la trace de la matrice de densité réduite à un corps,

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathscr{N}\Gamma] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[\Gamma^{(1)}].$$

On remarque que si Γ est diagonale, *i.e.* Γ commute avec $\mathscr{N}$ et peut s'écrire sous la forme

$$\Gamma = \Gamma_0 \oplus \Gamma_1 \oplus \dots$$

avec Γ_n un opérateur positifs qui agit sur $\otimes_s^k \mathfrak{H}$, alors la matrice densité réduite $\Gamma^{(k)}$ peut être définie en termes de traces partielles. Plus précisément,

$$\Gamma^{(k)} = \sum_{k \geqslant n} \binom{n}{k} \mathrm{Tr}_{k+1 \to n}[\Gamma_n]$$

où $\mathrm{Tr}_{k+1\to n}$ indique la trace partielle par rapport à $n-k-1$ variables.

Une *observable* est un opérateur auto-adjoint $\mathbb{H}$ sur $\mathfrak{F}$. Sa moyenne dans l'état quantique Γ est donnée par $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathbb{H}\Gamma]$. En particulier, si Γ est un état pur $\Gamma = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, on obtient $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathbb{H}\Gamma] = \langle \Psi, \mathbb{H}\Psi\rangle$. Dans la suite, deux familles d'observables joueront un rôle important : celles construites à partir d'opérateurs sur $\mathfrak{H}$ ou $\mathfrak{H} \otimes_s \mathfrak{H}$. Comme vu auparavant, si h est un opérateur auto-adjoint sur $\mathfrak{H}$, sa seconde quantification $\mathrm{d}\Gamma(h)$ définit un opérateur auto-adjoint sur $\mathfrak{F}$. Cet opérateur est souvent appelé *opérateur à un corps*. Un calcul facile montre que la moyenne de $\mathrm{d}\Gamma(h)$ dans un état quantique Γ peut s'écrire en termes de sa matrice densité réduite à un corps

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathrm{d}\Gamma(h)\Gamma] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}}[h\Gamma^{(1)}].$$

De même, si w est un opérateur auto-adjoint sur $\mathfrak{H} \otimes_s \mathfrak{H}$, sa seconde quantification est donnée par

$$\mathbb{W} = 0 \oplus 0 \oplus \bigoplus_{n=2}^{\infty} \left(\sum_{1 \leqslant i < j \leqslant n} (w)_{i,j} \right) = 0 \oplus 0 \oplus \bigoplus_{n=2}^{\infty} \left(\frac{n(n-1)}{2} w \otimes_s \mathbb{1}_{n-2} \right). \tag{12}$$

Sa moyenne peut donc s'écrire en termes des matrices densités réduites à deux corps

$$\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}}[\mathbb{W}\Gamma] = \mathrm{Tr}_{\mathfrak{H}\otimes_s\mathfrak{H}}[w\Gamma^{(2)}].$$