Séminaire BOURBAKI Mars 2004
56e année, 2003-2004, n° 930, p. 147 à 164

ÉQUATIONS DE CHAMP MOYEN POUR LA DYNAMIQUE QUANTIQUE D'UN GRAND NOMBRE DE PARTICULES [d'après Bardos, Erdös, 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

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

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

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

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

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

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

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

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* $H_N : C_0^\infty(\mathbf{R}^{3N}) \to L^2(\mathbf{R}^{3N})$ *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

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

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

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

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

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

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 $N \geqslant k$,

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

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

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

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 $(\rho_{N:k})_{N\geqslant 1}$ 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 $L^2(\mathbf{R}^{3k})$,

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

Un argument d'extraction diagonale assure ainsi l'existence d'une suite $(\rho^{(k)})_{k\geqslant 1}$. 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

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

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 $k \geqslant 1$,

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

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 $(x_1, \ldots, x_N)$: pour toute permutation σ de $\{1, \ldots, N\}$,

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

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])

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

où $(\psi_{j,0})_{1\leqslant j\leqslant N}$ 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 $(\psi_{j,0})_{j\geqslant 1}$ de $L^2(\mathbf{R}^3)$, on montre que, pour tout $k \geqslant 1$, $\rho_{N:k}(t)$ 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 $(\psi_j(t))_{1\leqslant j\leqslant N}$ 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,

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

quand N tend vers l'infini. Enfin, pour chaque N, le repère mobile $(\psi_j(t))_{1\leqslant j\leqslant N}$ 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

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

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 sytème, 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

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

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

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

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 $m \geqslant 1$, 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

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

1.3. Le théorème de convergence

Nous pouvons maintenant énoncer le résultat qui fait l'objet de cet exposé.

Théorème 1.2 ([2], [6], [12]). — *Soit* $\psi_0 \in H^2(\mathbf{R}^3)$, *et soit* $\psi \in C(\mathbf{R}, H^2(\mathbf{R}^3))$ *la solution du problème de Cauchy pour l'équation de Hartree* (11) *avec donnée initiale* ψ_0. *Pour tout* $N \geqslant 1$, *soit* Ψ_N *la solution du problème à* N *corps* (3), (6) *telle que* $\Psi_N(0) = \Psi_{N,0} = \psi_0^{\otimes N}$. *Pour tout entier* $k \geqslant 1$, *pour tout nombre réel* t, *la suite* $(\rho_{N:k}(t))_{N\geqslant k}$ *définie par* (7) *vérifie, pour tout opérateur compact* A *sur* $L^2(\mathbf{R}^{3k})$,

$$\mathrm{Tr}(A\rho_{N:k}(t)) \longrightarrow \langle \psi(t)^{\otimes k} | A\psi(t)^{\otimes k}\rangle_{L^2}$$

lorsque N *tend vers l'infini, localement uniformément par rapport à* t.

L'équation de Hartree (11) apparaît donc comme l'évolution d'une particule typique de $\mathbf{R}^3$, soumise à l'interaction moyenne résultant d'un grand nombre d'autres particules du même type ; c'est un exemple *d'équation de champ moyen*.

Les premiers résultats proches du théorème 1.2 semblent avoir été obtenus dans le cadre de la théorie quantique des champs, c'est–à–dire avec des données dépendant effectivement d'une infinité de variables : *cf.* Hepp [18] pour des potentiels réguliers, puis Ginibre–Velo [14]. Dans ce contexte, l'asymptotique peut être comprise comme une limite classique associée à l'hamiltonien de Hartree, la valeur moyenne de l'opérateur de nombre tendant vers l'infini. Néanmoins, le type de données utilisées ne permet pas de couvrir le théorème ci–dessus.

En 1980, une première démonstration est proposée par Spohn [27], dans le cas d'un potentiel borné, avec une donnée initiale $\psi_0 \in L^2(\mathbf{R}^3)$, en passant directement à la limite dans l'expression de ρ_N en série de perturbations. De plus, la convergence de $\rho_{N:k}(t)$ vers $|\psi(t)^{\otimes k}\rangle\langle\psi(t)^{\otimes k}|$ a alors lieu en norme trace (*cf.* l'appendice de [4] pour une démonstration plus détaillée).

Afin de couvrir des potentiels plus singuliers, Bardos, Golse et Mauser ont récemment proposé dans [6] une autre approche, consistant d'abord à passer à la limite dans le système d'équations vérifié par $(\rho_{N:k})_{1\leqslant k\leqslant N}$. On obtient un système infini d'équations pour toute valeur d'adhérence $(\rho^{(k)})_{k\geqslant 1}$ dont la suite des projecteurs $(|\psi^{\otimes k}\rangle\langle\psi^{\otimes k}|)_{k\geqslant 1}$ est solution. Il reste alors à établir un théorème d'unicité pour ce système. Si la première partie de cette stratégie est menée à bien dans [6] pour des potentiels coulombiens (avec d'ailleurs une plus grande généralité sur les données initiales, *cf. infra*), la seconde partie n'y est traitée que sous l'hypothèse V_1 borné. Plus récemment, Erdös et Yau [12] ont complété ce programme en démontrant l'unicité de ce même système dans une classe de suites d'opérateurs à trace qui permet de contrôler les singularités coulombiennes du potentiel.

2. LE CAS DES BOSONS : ESQUISSE DE LA DÉMONSTRATION

2.1. La hiérarchie BBGKY quantique

Écrivons l'équation sur $\rho_N(t) = |\Psi_N(t)\rangle\langle\Psi_N(t)|$ déduite de (3), dite équation de von Neumann,

$$i\partial_t \rho_N = [H_N, \rho_N]. \tag{12}$$

On en déduit le système suivant sur les traces partielles $(\rho_{N:k})_{1\leqslant k\leqslant N}$, que nous écrivons pour les noyaux :

$$\begin{aligned} &i\partial_t \rho_{N:k}(t,X,Y) = \\ &-(\Delta_X - \Delta_Y)\rho_{N:k}(t,X,Y) + \frac{1}{N}\sum_{1\leqslant j<l\leqslant k}(V_1(|x_j - x_l|) - V_1(|y_j - y_l|))\rho_{N:k}(t,X,Y) \\ &\quad + \frac{N-k}{N}\sum_{1\leqslant j\leqslant k}\int_{\mathbf{R}^3}(V_1(|x_j - z|) - V_1(|y_j - z|))\rho_{N:k+1}(t,X,z,Y,z)\,dz, \\ &\qquad\qquad 1\leqslant k\leqslant N-1, \end{aligned} \tag{13}$$

où l'on a regroupé les termes en utilisant la symétrie par rapport aux variables. En passant à la limite formellement dans (13) lorsque N tend vers l'infini, on obtient un système infini sur une suite d'inconnues $(\rho^{(k)})_{k\geqslant 1}$,

$$\begin{aligned} i\partial_t \rho^{(k)} &= -(\Delta_X - \Delta_Y)\rho^{(k)}(t,X,Y) \\ &\quad + \sum_{1\leqslant j\leqslant k}\int_{\mathbf{R}^3}(V_1(|x_j - z|) - V_1(|y_j - z|))\rho^{(k+1)}(t,X,z,Y,z)\,dz,\ k\geqslant 1. \end{aligned} \tag{14}$$

Les systèmes (13) et (14) constituent la version quantique de la « hiérarchie BBGKY » (Bogoliubov, Born et Green, Kirkwood, Yvon) introduite à partir des années 1930 en mécanique classique. Nous renvoyons à [16] pour une introduction unifiée aux théories de champ moyen dans les cadres classique et quantique.

Passons à la justification du passage à la limite ci-dessus. Montrons tout d'abord l'existence d'une valeur d'adhérence $(\rho^{(k)})$. Compte tenu du fait que les opérateurs $\rho_{N:k}$ sont positifs de trace 1, le seul point restant à élucider est l'équicontinuité en temps des quantités $\mathrm{Tr}(A\rho_{N:k})$ lorsque N tend vers l'infini, et A décrit les opérateurs compacts. Par un argument facile de densité, on peut supposer que le noyau de A est C^∞ à support compact dans $\mathbf{R}^{3k}\times\mathbf{R}^{3k}$. On utilise alors l'équation (13) pour estimer la dérivée par rapport à t de $\mathrm{Tr}(A\rho_{N:k})$. Seule la contribution du troisième terme au second membre de (13) pose une difficulté, que l'on résout en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$|\rho_{N:k+1}(t,X,z,Y,z)| \leqslant \rho_{N:k+1}(t,X,z,X,z)^{1/2}\rho_{N:k+1}(t,Y,z,Y,z)^{1/2}$$

et le fait que le potentiel d'interaction appartient à $L^2(\mathbf{R}^3) + L^\infty(\mathbf{R}^3)$.

Théorème 2.1 ([6]). — *Supposons de plus qu'il existe une constante B telle que l'énergie totale E_N du système vérifie, pour tout $N \geqslant 1$,*

$$E_N \leqslant B\,N. \tag{15}$$

Alors toute valeur d'adhérence $(\rho^{(k)})$ de $(\rho_{N:k})$ vérifie le système (14).

Remarquons que le résultat ci–dessus concerne des données beaucoup plus générales que le théorème 1.2. Dans le cas d'une donnée du type $\Psi_{N,0} = \psi_0^{\otimes N}$ et d'un potentiel V_1 vérifiant (10), on vérifie aisément que la condition (15) équivaut à $\psi_0 \in H^1(\mathbf{R}^3)$. En outre, les hypothèses sur le potentiel V_1 peuvent être affaiblies : la démonstration du théorème 2.1 utilise seulement que la fonction V_1 est continue sur $]0,+\infty[$, tend vers 0 à l'infini et vérifie

$$\int_0^1 r^2 (V_1(r))^2\, dr < +\infty.$$

Esquisse de démonstration. — Compte tenu de la symétrie de Ψ_N par rapport aux N variables x_j, la condition (15) assure que, pour tout j, la norme $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ de $\nabla_{x_j}\Psi_N$ est bornée lorsque N tend vers l'infini. Cette estimation induit la propriété de continuité suivante : pour toute fonction $a \in C_0^\infty(\mathbf{R}^{3k}\times\mathbf{R}^{3k})$, le noyau

$$K_N(t,z,w) = \int_{\mathbf{R}^{3k}\times\mathbf{R}^{3k}} a(X,Y)\, \rho_{N:k+1}(t,X,z,Y,w)\, dX\, dY$$

vérifie

$$\sup_{N\geqslant 1, t\in\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^3} |K_N(t,z+h,z) - K_N(t,z,z)|\, dz \leqslant C|h|.$$

Cette propriété permet de passer à la limite faible dans le troisième terme du second membre de (13), les autres termes ne posant pas de problème. □

Enfin, on vérifie facilement qu'une suite $(\rho^{(k)})$ du type $(|\psi^{\otimes k}\rangle\langle\psi^{\otimes k}|)$ est solution de la hiérarchie (14) dès que ψ est solution de l'équation de Hartree (11). Le théorème 1.2 sera donc démontré dès que l'on aura établi un résultat d'unicité du problème de Cauchy pour le système (14).

Remarquons par ailleurs que le système (13) fournit une (autre) introduction naturelle de l'équation de Hartree (11) : si l'on cherche à « fermer » le système (13) dès la première équation en déterminant une courbe $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ dans l'espace des projecteurs de $L^2(\mathbf{R}^3)$ telle que $\rho^{(1)} = \rho$ et $\rho^{(2)} = \rho\otimes\rho$ vérifient la première équation de (13), on obtient l'équation de Hartree pour $\psi(t)$ (à un facteur de phase $\mathrm{e}^{i\theta(t)}$ près).

2.2. Un théorème d'unicité dans le cas d'un potentiel borné

Introduisons les opérateurs suivants agissant sur les espaces d'opérateurs à trace :

$$(16)\quad A_k\gamma^{(k)}\,(X,Y) = -(\Delta_X - \Delta_Y)\gamma^{(k)}(X,Y),$$
$$C_{k,k+1}\gamma^{(k+1)}\,(X,Y) = \sum_{1\leqslant j\leqslant k}\int_{\mathbf{R}^3}(V_1(|x_j-z|) - V_1(|y_j-z|))\gamma^{(k+1)}(X,z,Y,z)\,dz.$$

L'opérateur A_k est non borné sur l'espace de Banach $\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k}))$ et engendre le groupe d'isométries défini par

$$\exp(-itA_k)\gamma^{(k)} = \exp(it\Delta)\gamma^{(k)}\exp(-it\Delta).$$

En général, $C_{k,k+1}$ est un opérateur non borné de $\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k+3}))$ dans $\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k}))$. Néanmoins, si V_1 est une fonction bornée, alors on vérifie sans mal que $C_{k,k+1}$ est borné, avec l'estimation

$$\mathrm{Tr}(|C_{k,k+1}\gamma^{(k+1)}|) \leqslant 2\|V_1\|_{L^\infty}\,k\,\mathrm{Tr}(|\gamma^{(k)}|).$$

Le résultat d'unicité souhaité est alors un cas particulier du lemme suivant (avec $\nu = 1$) :

LEMME 2.2. — *Soit $(E_k)_{k\geqslant 1}$ une chaîne d'espaces de Banach. Pour tout k, soit A_k un opérateur non borné sur E_k engendrant un groupe à un paramètre d'isométries $\exp(-itA_k)$ sur E_k, et soit $C_{k,k+1}$ un opérateur borné de E_{k+1} dans E_k. On suppose qu'il existe $C>0$ tel que, pour tout $k\geqslant 1$,*

$$\|C_{k,k+1}\|_{E_{k+1}\to E_k} \leqslant Ck.$$

Pour tout k, soit $\gamma^{(k)}\in C(\mathbf{R},E_k)$ vérifiant $\gamma^{(k)}(0)=0$; on suppose que la suite $(\gamma^{(k)})$ vérifie le système infini

$$i\partial_t\gamma^{(k)} = A_k\gamma^{(k)} + C_{k,k+1}\gamma^{(k+1)},\ \ k\geqslant 1$$

et qu'il existe $\nu>0$ tel que

$$(17)\qquad \forall\,k\geqslant 1,\ \forall\,t\in\mathbf{R},\ \|\gamma^{(k)}(t)\|_{E_k}\leqslant \nu^k.$$

Alors $\gamma^{(k)}(t)=0$ pour tout k et pour tout t.

Démonstration. — La formule de variation de la constante donne

$$\gamma^{(k)}(t) = -i\int_0^t \exp(-i(t-s)A_k)\,C_{k,k+1}\gamma^{(k+1)}(s)\,ds,$$

et les estimées sur les opérateurs entraînent donc

$$\|\gamma^{(k)}(t)\|_{E_k} \leqslant Ck\left|\int_0^t \|\gamma^{(k+1)}(s)\|_{E_{k+1}}\,ds\right|.$$

Pour tout $T > 0$, pour tout $\sigma > 0$, posons

$$M_\sigma(T) = \sup_{|t|\leqslant T} \sup_{k\geqslant 1} \frac{\|\gamma^{(k)}(t)\|_{E_k}}{\nu^k(1+\sigma|t|)^k}$$

qui est fini grâce à l'hypothèse (17). Alors l'estimation ci–dessus conduit à

$$M_\sigma(T) \leqslant \sup_{|t|\leqslant T} \sup_{k\geqslant 1} \frac{C\nu M_\sigma(T)}{(1+\sigma|t|)^k} \int_0^{|t|} k(1+\sigma s)^{k+1}\, ds \leqslant \frac{C\nu}{\sigma}(1+\sigma T)^2\, M_\sigma(T),$$

ce qui, si l'on choisit $\sigma > 4C\nu$ et et $T = 1/\sigma$, impose $M_\sigma(T) = 0$, c'est–à–dire $\gamma^{(k)}(t) = 0$ pour tout $k \geqslant 1$ et pour $|t| < (4C\nu)^{-1}$. Le lemme résulte alors de l'invariance de l'équation par translation en temps. □

Le lemme ci–dessus est relié aux versions abstraites du théorème de Cauchy–Kowalevsky développées dans les années 1970 par Ovcyannikov [24], Nirenberg [22], Nishida [23] et Baouendi–Goulaouic [1].

2.3. Le cas d'un potentiel coulombien : choix de la chaîne d'espaces

Si le potentiel V_1 présente une singularité coulombienne, l'opérateur $C_{k,k+1}$ n'est plus borné de $\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k+3}))$ dans $\mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k}))$ et la démonstration ci–dessus ne s'applique plus. L'idée d'Erdös et Yau est d'introduire une nouvelle chaîne d'espaces d'opérateurs qui permette de se ramener au lemme 2.2. Introduisons, pour tout j,

$$S_j = \sqrt{I - \Delta_j}$$

et les « espaces de Sobolev d'opérateurs à trace » suivants,

$$\mathcal{H}^{1,(k)} = \{\gamma^{(k)} \in \mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k})), |S_1 \cdots S_k\, \gamma^{(k)}\, S_k \cdots S_1| \in \mathcal{L}^1(L^2(\mathbf{R}^{3k}))\}.$$

On vérifie que $\mathcal{H}^{1,(k)}$ est un espace de Banach pour la norme

$$\|\gamma^{(k)}\|_{\mathcal{H}^{1,(k)}} = \mathrm{Tr}(|S_1 \cdots S_k\, \gamma^{(k)}\, S_k \cdots S_1|).$$

Il est par ailleurs trivial que A_k engendre un groupe d'isométries de $\mathcal{H}^{1,(k)}$. De plus, Erdös et Yau montrent le lemme suivant :

LEMME 2.3 ([12]). — *Il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $k \geqslant 1$, l'opérateur $C_{k,k+1}$ est borné de $\mathcal{H}^{1,(k+1)}$ dans $\mathcal{H}^{1,(k)}$ avec une norme au plus égale à Ck.*

La preuve du lemme 2.3 est un ensemble assez technique de manipulations sur les opérateurs à traces, combinant des inégalités abstraites avec la version suivante, bien connue, de l'inégalité de Hardy :

$$\int_{\mathbf{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2}\, dx \leqslant 4 \int_{\mathbf{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2\, dx. \tag{18}$$

2.4. Le cas d'un potentiel coulombien : régularisation et propagation des estimées

Pour achever la démonstration du théorème 1.2 en appliquant le lemme 2.2, il convient de vérifier que les deux suites $(\gamma^{(k)}) = (\rho^{(k)})$ et $\gamma^{(k)} = (|\psi^{\otimes k}\rangle\langle\psi^{\otimes k}|)$ satisfont à l'hypothèse (17) de croissance géométrique des normes. Dans le cas de la seconde suite, cela ne pose pas de problème dès que $\psi_0 \in H^1(\mathbf{R}^3)$. Le cas de la première suite est beaucoup plus délicat, car il faut propager des estimations dans $\mathcal{H}^{1,(k)}$ par le flot du système (13). La démarche la plus naturelle consiste bien sûr à remplacer l'opérateur $S_1 \cdots S_k$ par une fonction de H_N, et un premier pas dans cette direction est l'inégalité suivante, que l'on déduit sans mal de la symétrie de ρ_N par rapport aux variables :

$$\|\rho_{N:k}(t)\|_{\mathcal{H}^{1,(k)}} \leqslant 2^k \ \mathrm{Tr}\Big(\Big(I - \frac{\Delta}{N}\Big)^k \rho_N(t)\Big), \ 2k \leqslant N. \tag{19}$$

D'un autre côté, à $t = 0$, le second membre de (19) est plus délicat à estimer, car il fait apparaître des termes du type $\Delta^k \psi_0$, dont l'estimation nécessite une trop grande régularité pour ψ_0. Pour pallier cet inconvénient, Erdös et Yau régularisent la donnée ψ_0 par le noyau de la chaleur $\exp(\kappa\Delta)$, où $\kappa = \kappa(N)$ doit être choisi assez grand pour permettre d'estimer le second membre de (19), et assez petit pour que l'erreur commise sur les données disparaisse par passage à la limite. C'est cette double contrainte qui impose finalement la régularité additionnelle $\psi_0 \in H^2(\mathbf{R}^3)$. En introduisant, pour tout $\delta > 0$, la solution Ψ_N^δ de (3) associée à la donnée initiale régularisée

$$\Psi_{N,0}^\delta = (\mathrm{e}^{\delta\Delta/N}\, \psi_0)^{\otimes N},$$

on vérifie les estimées suivantes :

Lemme 2.4 ([12]). — *Il existe $C > 0$ et, pour tous $\delta > 0, k \geqslant 1$, il existe $N(\delta, k)$ tel que, pour tout $N \geqslant N(\delta, k)$,*

$$\Big\langle \Big(I - \frac{\Delta}{N}\Big)^k \Psi_{N,0}^\delta \Big| \Psi_{N,0}^\delta \Big\rangle_{L^2(\mathbf{R}^{3N})} \leqslant (C\|\psi_0\|_{H^2})^k.$$

De plus,

$$\sup_{t\in\mathbf{R}} \|\Psi_N^\delta(t) - \Psi_N(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^{3N})} \leqslant \delta \|\psi_0\|_{H^2}. \tag{20}$$

Il faut maintenant propager les estimées sur Ψ_N^δ. On est alors conduit à comparer les puissances de $(I - \Delta/N)$ à celles de $(I + H_N/N)$, ce qui nécessite d'estimer des dérivées d'ordre arbitraire de V_1. C'est à ce stade qu'intervient pleinement l'hypothèse (10). La singularité à l'origine impose alors de tronquer le potentiel V_1 en le remplaçant par

$$V_1^\varepsilon(r) = \theta\Big(\frac{\sqrt{N}\, r}{\varepsilon}\Big) V_1(r),$$

où θ est une fonction de classe C^∞ valant 0 près de $r=0$, et valant 1 pour $r \geqslant 1$. On note H_N^ε l'hamiltonien correspondant, et $\Psi_N^{\delta,\varepsilon}$ la solution correspondante, avec donnée initiale $\Psi_{N,0}^\delta$. On démontre alors le lemme de perturbation suivant :

LEMME 2.5 ([12]). — *Il existe $\beta > 0$, $\widetilde{C} > 0$ et, pour tous $\varepsilon > 0$, $k \geqslant 1$, il existe un entier $\widetilde{N}(\varepsilon, k)$ tel que, pour tout $N \geqslant \widetilde{N}(\varepsilon, k)$,*

$$\widetilde{C}^{-k}\Big(\beta I - \frac{\Delta}{N}\Big)^k \leqslant \Big(\beta I + \frac{H_N^\varepsilon}{N}\Big)^k \leqslant \widetilde{C}^k\Big(\beta I - \frac{\Delta}{N}\Big)^k.$$

De plus, il existe $B > 0$ tel que, pour tout $t \in \mathbf{R}$,

$$\sup_{\delta>0}\limsup_{N\to\infty} \|\Psi_N^{\delta,\varepsilon}(t) - \Psi_N^\delta(t)\|_{L^2}^2 \leqslant B(1 + \|\psi_0\|_{H^2}^2)\,\varepsilon|t|. \tag{21}$$

La démonstration du théorème 1.2 peut alors se conclure ainsi : à δ, ε fixés, on passe à la limite dans le système (13) tronqué, selon le théorème 2.1, ou plutôt sa variante avec le potentiel tronqué V_1^ε. On constate que la troncature et la régularisation de la donnée, qui dépendent de N, disparaissent par passage à la limite quand N tend vers l'infini, de sorte que la valeur d'adhérence $(\rho^{\delta,\varepsilon,(k)})$ ainsi obtenue est solution de la hiérarchie BBGKY (14) avec la condition initiale $(|\psi_0^{\otimes k}\rangle\langle\psi_0^{\otimes k}|)$, tout en vérifiant les estimations de croissance géométrique (17) dans la chaîne $(\mathcal{H}^{1,(k)})$, grâce aux lemmes 2.4 et 2.5. Le lemme 2.2 assure donc que $\rho^{\delta,\varepsilon,(k)}(t) = |\psi(t)^{\otimes k}\rangle\langle\psi(t)^{\otimes k}|$ pour tout t, et les estimations d'erreur (20) et (21) permettent de passer à la limite quand ε et δ tendent vers 0.

3. LE CAS DES FERMIONS

Les résultats dans ce cas sont plus récents et, dans le cas coulombien, n'ont probablement pas atteint leur forme définitive. Aussi nous contentons-nous d'en donner un bref aperçu.

3.1. Les déterminants de Slater

L'espace des phases fermionique est le sous–espace fermé $L_a^2(\mathbf{R}^{3N})$ de $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ constitué des fonctions d'ondes antisymétriques en les N variables $x_1, \dots, x_N$ de $\mathbf{R}^3$; il s'identifie à $\bigwedge^N(L^2(\mathbf{R}^3))$. Pour toute permutation σ de $\{1, \dots, N\}$, on désigne par U_σ l'opérateur unitaire de $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ défini par

$$U_\sigma\Psi(x_1, \dots, x_N) = \Psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}),$$

de sorte que le projecteur orthogonal sur $L_a^2(\mathbf{R}^{3N})$ est $P_N = (N!)^{-1}\Sigma_N$, avec

$$\Sigma_N = \sum_\sigma \varepsilon(\sigma)\,U_\sigma.$$

Si $(\psi_1, \ldots, \psi_N)$ est un système orthonormé de $L^2(\mathbf{R}^3)$, on normalise l'élément $\psi_1 \wedge \cdots \wedge \psi_N$ de $L^2_a(\mathbf{R}^{3N})$ en posant

$$S(\psi_1, \ldots, \psi_N)(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_j(x_k))_{1 \leqslant j,k \leqslant N}. \tag{22}$$

Les références historiques pour l'introduction de ces quantités comme *Ansatz* de l'équation de Schrödinger stationnaire sont Fock [13] et Slater [26]. Les traces partielles du projecteur orthogonal associé

$$\rho_N^S = |S(\psi_1, \ldots, \psi_N)\rangle\langle S(\psi_1, \ldots, \psi_N)|$$

sont données par les expressions suivantes :

$$\rho_{N:1}^S = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\psi_j\rangle\langle\psi_j|, \quad \rho_{N:k}^S = \frac{N^k (N-k)!}{N!} (\rho_{N:1}^S)^{\otimes k} \, \Sigma_k. \tag{23}$$

Ces formules inspirent la définition suivante, introduite dans [3].

DÉFINITION 3.1. — *Pour tout N, soit ρ_N un opérateur positif sur $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ de trace 1, et qui commute aux opérateurs U_σ. On dit que la suite (ρ_N) vérifie la propriété de fermeture de Slater si, pour tout entier $k \geqslant 1$, quand N tend vers l'infini,*

$$\mathrm{Tr}(|\rho_{N:k} - (\rho_{N:1})^{\otimes k} \Sigma_k|) \longrightarrow 0.$$

3.2. Le système de Hartree-Fock

Revenons à la hiérarchie (13) et cherchons cette fois un système orthonormé mobile de N vecteurs $(\psi_1(t), \ldots, \psi_N(t))$ tel que

$$\rho^{(1)}(t) = (|S(\psi(t), \ldots, \psi_N(t)\rangle\langle S(\psi(t), \ldots, \psi_N(t)|)_{:1}, \quad \rho^{(2)}(t) = (\rho^{(1)}(t) \otimes \rho^{(1)}(t))\Sigma_2$$

vérifie la première équation de (13),

$$i\partial_t \rho^{(1)}(t,x,y) = -(\Delta_x - \Delta_y)\rho^{(1)}(t,x,y) + \int_{\mathbf{R}^3} (V_1(|x-z|) - V_1(|y-z|))\rho^{(2)}(t,x,z,y,z)\, dz.$$

Après une renormalisation convenable, on aboutit au système d'évolution de Hartree–Fock, introduit par Dirac [11],

$$\begin{aligned} i\partial_t \psi_j &= -\Delta\psi_j + W\psi_j - \frac{1}{N}\sum_{l=1}^N W_{jl}\psi_l, \quad 1 \leqslant j \leqslant N, \\ W(t,x) &= \int_{\mathbf{R}^3} V_1(|x-z|)\, \frac{1}{N}\sum_{l=1}^N |\psi_l(t,z)|^2\, dz, \\ W_{jl}(t,x) &= \int_{\mathbf{R}^3} V_1(|x-z|)\, \psi_j(t,z)\, \overline{\psi_l(t,z)}\, dz. \end{aligned} \tag{24}$$

Notons qu'au potentiel d'interaction moyenne W déjà présent dans l'équation de Hartree (11) s'est ajouté un « potentiel d'échange » W_{jl}. On peut également obtenir le système (24) comme une évolution hamiltonienne sur $L^2(\mathbf{R}^3)^N$ associée à l'énergie

$$(25)\quad E_N^{HF} = \sum_{j=1}^{N} \int_{\mathbf{R}^3} |\nabla\psi_j|^2\, dx$$
$$+ \frac{1}{2N} \int_{\mathbf{R}^3\times\mathbf{R}^3} V_1(|x-z|) \left(\Big(\sum_j |\psi_j(x)|^2\Big)\Big(\sum_j |\psi_j(z)|^2\Big) - \Big|\sum_j \psi_j(x)\overline{\psi_j(z)}\Big|^2 \right) dx\, dz.$$

Le problème de Cauchy pour (24) ne pose pas de difficultés si V_1 est borné. Dans le cas d'un potentiel coulombien, il a été étudié par Chadam et Glassey [10] puis par Bove, Da Prato et Fano [7] dans le formalisme des opérateurs.

THÉORÈME 3.2 ([10], [7]). — *On suppose V_1 coulombien. Pour tout entier $m \geqslant 1$, pour tout système orthonormé de $L^2(\mathbf{R}^3)$ $(\psi_{1,0}, \dots, \psi_{N,0})$ constitué de fonctions de $H^m(\mathbf{R}^3)$, il existe une unique solution $(\psi_1, \dots, \psi_N) \in C(\mathbf{R}, H^m(\mathbf{R}^3)^N)$ au système (3.2) avec la donnée initiale $(\psi_{1,0}, \dots, \psi_{N,0})$ en $t = 0$. De plus, le système $(\psi_1(t), \dots, \psi_N(t))$ est orthonormé pour tout t, et l'énergie (25) est constante au cours du temps.*

3.3. Le théorème d'approximation

Le résultat suivant est dû à Bardos, Golse, Gottlieb et Mauser.

THÉORÈME 3.3 ([3]). — *Soit $(\psi_{j,0})_{j\geqslant 1}$ un système orthonormé de $L^2(\mathbf{R}^3)$). Pour tout $N \geqslant 1$, on désigne par Ψ_N la solution de l'équation de Schrödinger (3) ayant pour donnée initiale $\Psi_{N,0} = S(\psi_{1,0}, \dots, \psi_{N,0})$. On note par ailleurs $(\psi_1^{(N)}, \dots, \psi_N^{(N)})$ la solution du système de Hartree–Fock (24) avec la donnée initiale $(\psi_{1,0}, \dots, \psi_{N,0})$, et $\Psi_N^S(t) = S(\psi_1^{(N)}(t), \dots, \psi_N^{(N)}(t))$ le déterminant de Slater correspondant. Alors les projecteurs $\rho_N(t) = |\Psi_N(t)\rangle\langle\Psi_N(t)|$ et $\rho_N^S(t) = |\Psi_N^S(t)\rangle\langle\Psi_N^S(t)|$ vérifient, pour tout $k \geqslant 1$, lorsque N tend vers l'infini,*

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

La démonstration de ce théorème est basée sur une analyse du second membre du système (13) pour la différence $\rho_{N:k} - \rho_{N:k}^S$, combinée avec une adaptation de la démonstration du lemme d'unicité (2.2). Pour $|t|$ au plus de l'ordre de l'inverse de $\|V_1\|_{L^\infty}$, on peut estimer la norme trace de la différence $\rho_{N:k}(t) - \rho_{N:k}^S(t)$ par ν^k/N (*cf.* [4]), mais ces estimations se dégradent vite au cours du temps.

La même approche montre, plus généralement, que la propriété de fermeture de Slater est conservée par la hiérarchie (13).

Dans le cas d'un potentiel coulombien répulsif, un résultat tout récent des mêmes auteurs [5] établit, en adaptant les techniques d'Erdös et Yau, un résultat analogue, mais sous des hypothèses beaucoup plus fortes sur les données initiales. Pour tout $m \geqslant 1$, on demande que

$$\sup_{N\geqslant 1} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \|\psi_{j,0}\|^2_{H^m(\mathbf{R}^3)} < +\infty.$$

4. REMARQUES ET QUESTIONS OUVERTES

4.1. Le problème de la régularité des données

Le théorème de Kato 0.1 assure l'existence d'un groupe à un paramètre unitaire sur $L^2(\mathbf{R}^{3N})$. Par ailleurs, on peut aussi vérifier (bien que cela ne soit pas explicitement écrit dans [15]) que l'équation de Hartree (11) est bien posée dans $L^2(\mathbf{R}^3)$. L'idée est d'utiliser les propriétés dispersives du flot de Schrödinger sur $\mathbf{R}^3$ à travers les inégalités suivantes, dites de Strichartz (voir par exemple [9]),

$$\left(\int_{\mathbf{R}} \| \mathrm{e}^{it\Delta} f\|^p_{L^q(\mathbf{R}^3)}\, dt\right)^{1/p} \leqslant C\|f\|_{L^2(\mathbf{R}^3)}$$

pour tout couple (p, q) de nombres réels vérifiant

$$\frac{2}{p} + \frac{3}{q} = \frac{3}{2},\ p \geqslant 2,$$

en s'inspirant d'une démonstration analogue donnée par Tsutsumi [28] pour une équation de Schrödinger avec une perturbation non linéaire locale.

Il est donc naturel de se demander si le théorème 1.2 reste vrai pour des données $\psi_0 \in L^2(\mathbf{R}^3)$ (ce qui est déjà connu, comme on l'a dit, si le potentiel est borné). Dans le cas coulombien, la réponse à cette question nécessiterait sans doute de comprendre ce que deviennent les inégalités de Strichartz sur la solution Ψ_N et sur les opérateurs $\rho_{N:k}$, et en quoi elles peuvent éviter le recours à la chaîne d'espaces $(\mathcal{H}^{1,(k)})$, qui est une grosse consommatrice de dérivées... En outre, cette approche pourrait se révéler utile dans le cas des fermions, les inégalités de Strichartz pouvant également s'appliquer au système de Hartree-Fock.

4.2. Principe d'exclusion de Pauli et énergie d'interaction

Dans le cas d'un potentiel coulombien répulsif, la pertinence de l'approximation par le système de Hartree-Fock se heurte à la remarque suivante, qui nous a été communiquée par C. Bardos et F. Golse. Si $(\psi_1, \ldots, \psi_N)$ est un système orthonormé de $L^2(\mathbf{R}^3)$, un résultat de Lieb–Thirring [21] assure que la densité moyenne

$$\widetilde{\rho}(x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} |\psi_j(x)|^2$$

est contrôlée à l'aide de l'énergie cinétique moyenne

$$T = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\int_{\mathbf{R}^3}|\nabla\psi_j|^2\,dx$$

selon l'inégalité

$$\int_{\mathbf{R}^3}\widetilde{\rho}(x)^{5/3}\,dx \leqslant A\,N^{-2/3}T$$

où A est une constante universelle. En combinant cette information avec l'inégalité de Hardy–Littlewood–Sobolev, on constate que

$$\int_{\mathbf{R}^3\times\mathbf{R}^3}\frac{\widetilde{\rho}(x)\,\widetilde{\rho}(y)}{|x-y|}\,dx\,dy \leqslant B\,\|\widetilde{\rho}\|_{L^{6/5}}^2 \leqslant BN^{-1/3}T^{1/2}.$$

Il en résulte que, si l'énergie moyenne de Hartree–Fock E_N^{HF}/N est bornée, l'énergie d'interaction tend uniformément vers 0 comme $N^{-1/3}$. En reportant cette information dans le système (3.2), on en déduit que la solution $(\psi_1^{(N)},\dots,\psi_N^{(N)})$ de ce système est approchée pour tout temps par la solution de l'équation de Schrödinger *libre* selon

$$\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\|\psi_j^{(N)}(t)-\mathrm{e}^{it\Delta}\,\psi_{j,0}\|_{L^2}^2 \leqslant CN^{-1/3}.$$

Dans ce cas, la pertinence du système de Hartree–Fock par rapport au système de Schrödinger libre ne serait confirmée que si l'approximation établie dans la version coulombienne du théorème 3.3 était d'ordre supérieur. Ce fait ne semble pas être une conséquence des résultats de [5].

Une autre interprétation de ce phénomène pourrait être que la normalisation (6), si elle est justifiée dans le cas des bosons, devient trop brutale dans le cadre du principe d'exclusion de Pauli, et qu'il conviendrait de la remplacer par une normalisation mieux adaptée aux interactions coulombiennes des fermions.

RÉFÉRENCES

[1] M.S. Baouendi & C. Goulaouic – « Remarks on the abstract form of nonlinear Cauchy-Kovalevsky theorems », *Comm. Partial Differential Equations* **2** (1977), p. 1151–1162.

[2] C. Bardos, L. Erdös, F. Golse, N. Mauser & H.T. Yau – « Derivation of the Schrödinger-Poisson equation from the quantum N-body problem », *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **334** (2002), p. 515–520.

[3] C. Bardos, F. Golse, A. Gottlieb & N. Mauser – « Mean field dynamics of fermions and the time-dependent Hartree-Fock equation », *J. Math. Pures Appl.* **82** (2003), p. 665–683.

[4] ______, « Accuracy of the time-dependent Hartree-Fock approximation for uncorrelated initial states », *J. Statist. Phys.* **115** (2004), à paraître.

[5] ______, « Derivation of the time-dependent Hartree-Fock equation with Coulomb potential », manuscrit, 2004.

[6] C. Bardos, F. Golse & N. Mauser – « Weak coupling limit of the N-particle Schrödinger equation », *Methods Appl. Anal.* **7** (2000), p. 275–293.

[7] A. Bove, G. Da Prato & G. Fano – « On the Hartree-Fock time-dependent problem », *Comm. Math. Phys.* **49** (1976), p. 25–33.

[8] I. Catto, C. Le Bris & P.-L. Lions – *Mathematical theory of thermodynamic limits : Thomas-Fermi type models*, Oxford Mathematical Monographs, Clarendon Press, 1998.

[9] T. Cazenave – *Semilinear Schrödinger Equations*, Courant Lecture Notes in Mathematics, vol. 10, American Mathematical Society, 2003.

[10] G. Chadam & R. Glassey – « Global existence of solutions to the Cauchy problem for time-dependent Hartree-Fock equations », *J. Math. Phys.* **16** (1975), p. 1122–1130.

[11] P.A.M. Dirac – « Note on exchange phenomena in the Thomas atom », *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **26** (1930), p. 376–385.

[12] L. Erdös & H.T. Yau – « Derivation of the nonlinear Schrödinger equation from a many body Coulomb system », *Adv. Theor. Math. Phys.* **5** (2001), p. 1169–1205.

[13] V. Fock – « Näherungsmethode zur Lösing des quantenmechanischen Mehrkörperproblems », *Z. Phys.* **61** (1930), p. 126–148.

[14] J. Ginibre & G. Velo – « The classical field limit of scattering theory for non-relativistic many-bosons systems, I-II », *Comm. Math. Phys.* **66** (1979), p. 37–76, **68** (1979), p. 45-68.

[15] ______, « On a class of nonlinear Schrödinger equations with nonlocal interactions », *Math. Z.* **170** (1980), p. 109–145.

[16] F. Golse – « The mean-field limit for the dynamics of large particle systems », in *Actes des Journées « Équations aux dérivées partielles » (Forges-les-Eaux, 2-6 juin 2003), GDR 2434 du CNRS*, Version électronique disponible sur le site : `http://www.math.sciences.univ-nantes.fr/edpa`.

[17] D. Hartree – « The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods », *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **24** (1928), p. 89–132.

[18] K. Hepp – « The classical limit for quantum mechanical correlation functions », *Comm. Math. Phys.* **35** (1974), p. 265–277.

[19] T. Kato – « Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type », *Trans. Amer. Math. Soc.* **70** (1951), p. 195–201.

[20] E.H. Lieb – « The stability of matter : from atoms to stars », *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **22** (1990), p. 1–49.

[21] E.H. Lieb & W.E. Thirring – « Inequalities for the moments of the eigenvalues of the Schrödinger Hamiltonian and their relation to Sobolev inequalities », in *Studies in Mathematical Physics, Essays in Honor of Valentine Bargmann* (E.H. Lieb, B. Simon & W.E. Thirring, éds.), Princeton University Press, 1976.

[22] L. Nirenberg – « On an abstract form of the nonlinear Cauchy-Kowalewski theorem », *J. Differential Geom.* **6** (1972), p. 561–576.

[23] T. Nishida – « A note on a theorem of Nirenberg », *J. Differential Geom.* **12** (1977), p. 629–633.

[24] L.V. Ovcyannikov – « A nonlinear Cauchy problem in a scale of Banach spaces », *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **200** (1971), no. 4, traduction anglaise dans *Sov. Math. Dokl.* **12** (1971), p. 1497-1502.

[25] M. Reed & B. Simon – *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. I-IV, Academic Press, 1978.

[26] J.C. Slater – « A note on Hartree's method », *Phys. Rev.* **35** (1930), p. 210–211.

[27] H. Spohn – « Kinetic equations from Hamiltonian dynamics : Markovian limits », *Rev. Modern Phys.* **53** (1980), p. 569–615.

[28] Y. Tsutsumi – « L^2-solutions for nonlinear Schrödinger equations and nonlinear groups », *Funkcial. Ekvac.* **30** (1987), p. 115–125.

[29] H. Weyl – *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, 1928, traduction et deuxième édition : *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Dover, 1950.

Patrick GÉRARD

Université Paris XI
Département de Mathématiques
UMR 8628 du CNRS
Bâtiment 425
F-91405 Orsay Cedex
E-mail : `patrick.gerard@math.u-psud.fr`