Renormalisation de la charge pour le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit

Philippe Gravejat
École Polytechnique

Travaux en collaboration avec
Mathieu Lewin et Éric Séré

Introduction

1. L'opérateur de Dirac libre

L'opérateur de Dirac libre s'écrit

$$D^0 = -i \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \partial_k + \beta,$$

où $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \in \mathcal{M}_4(\mathbb{C})^3$ et $\beta \in \mathcal{M}_4(\mathbb{C})$ sont les matrices de Dirac. C'est un opérateur auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, dont le spectre est égal à

$$\sigma(D^0) =]-\infty, -1] \cup [1, +\infty[.$$

En particulier, l'opérateur D^0 n'est pas borné inférieurement.

2. L'approximation Hartree-Fock

a. Les états électroniques

Les états électroniques sont représentés par des projecteurs orthogonaux

$$P = \sum_{i \in I} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|.$$

Les fonctions d'ondes φ_i représentent les états électroniques individuels de chaque électron.
Le rang de P est le nombre d'électrons de l'état électronique considéré. Sa charge est donnée par

$$\mathrm{Ch}(P) = -e\ \mathrm{rg}(P) = -e\ \mathrm{tr}(P),$$

où $-e$ désigne la charge d'un électron.

b. L'énergie Hartree-Fock (réduite)

L'énergie Hartree-Fock (réduite) d'un état $P = \Gamma + 1/2$, soumis à une densité de charges extérieures ν, est donnée par

$$E^{\nu}_{(r)HF}(\Gamma) = \mathrm{tr}\left(D^0\Gamma\right) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\rho_\Gamma(y)}{|x-y|}dxdy$$
$$+\frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Gamma(x)\rho_\Gamma(y)}{|x-y|}dxdy - \left(\frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Gamma(x,y)|^2}{|x-y|}dxdy\right),$$

où $\alpha = e^2$ est la constante de structure fine de Sommerfeld.

Dans cette expression, $\Gamma(x,y)$ désigne le noyau associé à l'opérateur Γ, tandis que ρ_Γ est la densité de charges de l'état P, qui est définie par

$$\rho_\Gamma(x) = \mathrm{tr}_{\mathbb{C}^4}\ \Gamma(x,x).$$

En dimension infinie, l'opérateur Γ n'est jamais compact. Cette expression n'est donc pas bien définie.

3. Dérivation de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock

a. En dimension finie

On se place sur le tore de taille L, $\mathbb{T}_L \equiv (-L/2, L/2)^3$, et l'on considère l'espace de fonctions d'ondes

$$\mathcal{H}_L^\Lambda = \left\{\varphi \in L^2(\mathbb{T}_L, \mathbb{C}^4),\ \text{t.q. } \widehat{\varphi}\Big(\frac{2\pi k}{L}\Big) = 0,\ \forall |k| \geq \frac{\Lambda L}{2\pi}\right\},$$

muni d'un cut-off ultraviolet Λ.

Les états électroniques demeurent représentés par les projecteurs orthogonaux P dans $\mathcal{H}_L^\Lambda$, qui sont tous de rang fini.

L'énergie Hartree-Fock (réduite) de l'état $P = \Gamma + 1/2$ vaut désormais

$$\begin{aligned} E^{\nu}_{(r)HF}(\Gamma) = & \operatorname{tr}\Big(D^0\Gamma\Big) - \alpha \int_{\mathbb{T}_L}\int_{\mathbb{T}_L} \nu_L(x)\rho_\Gamma(y) W_L(x-y)\,dx\,dy \\ & + \frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{T}_L}\int_{\mathbb{T}_L} \rho_\Gamma(x)\rho_\Gamma(y) W_L(x-y)\,dx\,dy \\ & - \Big(\frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{T}_L}\int_{\mathbb{T}_L} |\Gamma(x,y)|^2 W_L(x-y)\,dx\,dy\Big), \end{aligned}$$

où les fonctions ν_L et W_L sont définies par

$$\nu_L(x) = \frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{L^3} \sum_{2\pi|k|/L \leq \Lambda} \widehat{\nu}\Big(\frac{2\pi k}{L}\Big) e^{\frac{i2\pi k.x}{L}}.$$

et

$$W_L(x) = \frac{1}{L^3}\Big(\sum_{2\pi|k|/L \leq \Lambda, k \neq 0} \frac{L^2}{\pi |k|^2} e^{\frac{i2\pi k.x}{L}} + \mu L^2 \Big).$$

Le vide polarisé est défini comme le minimiseur $P_L^\nu = \Gamma_L^\nu + 1/2$ du problème

$$E^\nu_{(r)HF}(\Gamma_L^\nu) = \min\Big\{E^\nu_{(r)HF}(\Gamma),\ \Gamma \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_L^\Lambda) \text{ t.q.} \\ \Gamma^* = \Gamma \text{ et } -\frac{I_{\mathcal{H}_L^\Lambda}}{2} \le \Gamma \le \frac{I_{\mathcal{H}_L^\Lambda}}{2}\Big\}.$$

Le vide libre P_L^0 correspond au cas où $\nu = 0$.

On peut tenter de définir les vides libre P^0 et polarisé P^ν dans tout l'espace $\mathbb{R}^3$ en prenant la limite thermodynamique $L \to +\infty$.

b. Limite thermodynamique

On suppose que $0 \leq \alpha (< 4/\pi)$ et $\Lambda > 0$ sont fixés.

Théorème (Hainzl, Lewin, Solovej [07]).
Il existe un unique opérateur $\mathcal{D}^0$, de la forme

$$\widehat{\mathcal{D}^0}(p) = g_1(|p|)\ \alpha.p + g_0(|p|)\ \beta,$$

tel que le projecteur orthogonal $\mathcal{P}^0 = \chi_{]-\infty,0]}(\mathcal{D}^0) = \Gamma^0 + 1/2$ vérifie

$$\|P_L^0 - \mathcal{P}^0\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H}_L^\Lambda)} \to 0, \text{ lorsque } L \to +\infty.$$

De plus, la densité de charges ρ_{Γ_0} vérifie

$$\rho_{\Gamma_0} = 0.$$

Dans le cas de l'énergie Hartree-Fock réduite, l'opérateur $\mathcal{D}^0$ est égal à

$$\mathcal{D}^0 = D^0.$$

On définit l'espace de Coulomb $\mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ par

$$\mathcal{C}(\mathbb{R}^3) = \Big\{ f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}^4, \text{ t.q. } \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\widehat{f}(k)|^2}{|k|^2} dk < +\infty \Big\}.$$

Théorème (Hainzl, Lewin, Solovej [07]).
Soit $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ *telle que* $\widehat{\nu}$ *est continue sur* $B(0,\Lambda)$. *L'énergie* $E^{\nu}_{(r)HF}$ *possède un minimiseur* $P^{\nu}_L = \Gamma^{\nu}_L + 1/2$, *qui est un projecteur orthogonal de* $\mathcal{H}^{\Lambda}_L$. *De plus, son énergie vérifie*

$$E^{\nu}_{(r)HF}(\Gamma^{\nu}_L) - E^{0}_{(r)HF}(\Gamma^{0}_L) \to E^{\nu}_{(r)BDF}(Q^{\nu}) = \min_{Q \in \mathcal{Q}_\Lambda} E_{(r)BDF}(Q),$$

lorsque $L \to +\infty$, *tandis que le noyau*

$$Q^{\nu}_L(x,y) = \Gamma^{\nu}_L(x,y) - \Gamma^{0}_L(x,y)$$

converge, uniformément sur tout compact de $\mathbb{R}^6$, *vers le noyau* $Q^{\nu}(x,y)$ *d'un minimiseur* Q^{ν} *de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite)* $E_{(r)BDF}$.

4. L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite)

L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite) est définie par

$$E^{\nu}_{(r)BDF}(Q) = \mathrm{tr}_{\mathcal{P}^0}\left(\mathcal{D}^0 Q\right) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\rho_Q(y)}{|x-y|}dxdy$$
$$+\frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\rho_Q(x)\rho_Q(x)}{|x-y|}dxdy - \left(\frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|Q(x,y)|^2}{|x-y|}dxdy\right).$$

(Cf Chaix et Iracane [89] et Chaix, Iracane et P.-L. Lions [89]).

L'opérateur de Hilbert-Schmidt Q, de noyau $Q(x,y)$, est défini sur l'espace

$$\mathcal{H}^\Lambda = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4),\ \text{t.q. supp}(\widehat{f}) \subset B(0,\Lambda)\},$$

et appartient à l'ensemble

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}^\Lambda = \Big\{Q \in \mathfrak{S}_2(\mathcal{H}^\Lambda),\ \text{t.q. } & Q^{--} = \mathcal{P}^0 Q \mathcal{P}^0 \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda),\\ & Q^{++} = (I-\mathcal{P}^0)Q\big(I-\mathcal{P}^0\big) \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda),\\ & Q^* = Q \text{ et } -\mathcal{P}^0 \leq Q \leq I - \mathcal{P}^0\Big\}.\end{aligned}$$

La composante cinétique de l'énergie est définie par

$$\mathrm{tr}_{\mathcal{P}^0}\big(\mathcal{D}^0 Q\big) = \mathrm{tr}\big(\mathcal{D}^0 Q^{--}\big) + \mathrm{tr}\big(\mathcal{D}^0 Q^{++}\big).$$

La densité de charges ρ_Q est définie par

$$\widehat{\rho_Q}(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\substack{|p+k/2|<\Lambda \\ |p-k/2|<\Lambda}} \mathrm{tr}_{\mathbb{C}^4} \widehat{Q}\Big(p+\frac{k}{2}, p-\frac{k}{2}\Big)\, dp.$$

Le vide polarisé est défini comme le projecteur orthogonal P^ν tel que l'opérateur $Q^\nu = P^\nu - \mathcal{P}^0$ vérifie

$$E_{(r)BDF}(Q^\nu) = \min_{Q \in \mathcal{Q}^\Lambda} E_{(r)BDF}(Q).$$

Il est (au moins formellement) solution des équations auto-consistantes

$$\begin{aligned} Q^\nu &= \chi_{]-\infty,0]}\left(D_{Q^\nu}\right) - \mathcal{P}^0, \\ D_{Q^\nu} &= \mathcal{D}^0 + \alpha\left(\rho_{Q^\nu} - \nu\right) \star \frac{1}{|\cdot|} - \left(\alpha \frac{Q^\nu(x,y)}{|x-y|}\right). \end{aligned}$$

La configuration électronique à N électrons est définie comme le projecteur orthogonal P_N^ν tel que l'opérateur $Q_N^\nu = P_N^\nu - \mathcal{P}^0$ vérifie

$$E_{(r)BDF}(Q_N^\nu) = \min\left\{E_{(r)BDF}(Q),\ Q \in \mathcal{Q}^\Lambda \text{ t.q. } \mathrm{tr}_{\mathcal{P}^0}(Q) = N\right\}.$$

Elle est (au moins formellement) solution des équations auto-consistantes

$$\begin{aligned} Q_N^\nu &= \chi_{]-\infty,\mu_N]}\left(D_{Q_N^\nu}\right) - \mathcal{P}^0, \\ D_{Q_N^\nu} &= \mathcal{D}^0 + \alpha\left(\rho_{Q_N^\nu} - \nu\right) \star \frac{1}{|\cdot|} - \left(\alpha \frac{Q_N^\nu(x,y)}{|x-y|}\right). \end{aligned}$$

Les N électrons (réels) sont décrits par le projecteur orthogonal

$$\Gamma_N^\nu = \chi_{]0,\mu_N]}\left(D_{Q_N^\nu}\right).$$

I. Contexte mathématique

1. Définition de l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite)

L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite) est bien définie sur $\mathcal{Q}^\Lambda$.

Lemme (Bach-Barbaroux-Helffer-Siedentop [99]).
Soit $Q \in \mathcal{Q}^\Lambda$. Alors,

$$\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x,y)|^2}{|x-y|} dxdy \leq \frac{\pi}{2}\mathrm{tr}\Big(|\mathcal{D}^0|Q^2\Big).$$

Lemme (Hainzl-Lewin-Séré [09]).
Soit $Q \in \mathcal{Q}^\Lambda$. Il existe une constante positive K_Λ telle que

$$\|\rho_Q\|_{L^2} + \|\rho_Q\|_{\mathcal{C}} \leq K_\Lambda\Big(\|Q\|_{\mathfrak{S}_2} + \|Q^{--}\|_{\mathfrak{S}_1} + \|Q^{++}\|_{\mathfrak{S}_1}\Big).$$

Théorème (Hainzl-Lewin-Séré [05, 05]).
Soit $\Lambda > 0$, $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ *et* $0 \leq \alpha (< \pi/4)$. *L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite) est bien définie sur* $\mathcal{Q}^\Lambda$ *et vérifie*

$$\forall Q \in \mathcal{Q}^\Lambda, E_{(r)BDF}(Q) + \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(x)\nu(y)}{|x-y|} dxdy \geq 0.$$

En particulier, si $\nu = 0$, *l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite) a un unique minimiseur* $Q = 0$.

(Cf également Chaix, Iracane et P.-L. Lions [89]).

2. Construction du vide polarisé

Théorème (Hainzl-Lewin-Séré [05, 05]).
Soit $\Lambda > 0$, $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ *et* $0 \leq \alpha (< \pi/4)$. *L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (réduite) possède un minimiseur* Q^ν *sur* $\mathcal{Q}^\Lambda$. *L'opérateur* Q^ν *est solution des équations auto-consistantes*

$$Q^\nu = \chi_{]-\infty,0[}\Big(D_{Q^\nu}\Big) - \mathcal{P}^0 + \delta,$$
$$D_{Q^\nu} = \mathcal{D}^0 + \alpha\Big(\rho_{Q^\nu} - \nu\Big) \star \frac{1}{|\cdot|} - \left(\alpha \frac{Q^\nu(x,y)}{|x-y|}\right).$$

où δ *est un opérateur de rang fini tel que* $\mathrm{Im}(\delta) \subset \mathrm{Ker}(D_{Q^\nu})$.
De plus, si $\alpha\|\nu\|_{\mathcal{C}}$ *est suffisamment petit, alors, le minimiseur* Q^ν *est unique, et vérifie*

$$\delta = 0 \text{ et } \mathrm{tr}_{\mathcal{P}^0} Q^\nu = 0.$$

3. Construction de l'état électronique à N électrons

Soit $\Lambda > 0$, $\nu \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ et $0 \leq \alpha (< \pi/4)$. On note

$$\forall q \in \mathbb{R}, \mathcal{E}^{\nu}_{(r)BDF}(q) = \min\Big\{E_{(r)BDF}(Q),\ Q \in \mathcal{Q}^{\Lambda} \text{ t.q. } \mathrm{tr}_{\mathcal{P}^0}(Q) = q\Big\}.$$

Théorème (Hainzl-Lewin-Séré [09]).
Si la condition (de type HVZ)

$$\forall k \in \mathbb{R}^*, \mathcal{E}^{\nu}(q) < \mathcal{E}^{\nu}(q-k) + \mathcal{E}^0(k),$$

est vérifiée, le problème de minimisation ci-dessus possède un minimiseur Q^{ν}_q sur $\mathcal{Q}^{\Lambda}$.
Dans ce cas, l'opérateur Q^{ν}_q est solution des équations auto-consistantes

$$Q^{\nu}_q = \chi_{]-\infty,\mu[}\Big(D_{Q^{\nu}_q}\Big) - \mathcal{P}^0 + \delta,$$

$$D_{Q^{\nu}_q} = \mathcal{D}^0 + \alpha\Big(\rho_{Q^{\nu}_q} - \nu\Big) \star \frac{1}{|\cdot|} - \Big(\alpha \frac{Q^{\nu}_q(x,y)}{|x-y|}\Big).$$

où $\mu \in [-1,1]$ et δ est un opérateur tel que $\mathrm{Im}(\delta) \subset \mathrm{Ker}(D_{Q^{\nu}_q} - \mu I)$.

II. Principaux résultats sur le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réduit

1. Construction de l'état électronique à N électrons

Théorème 1 (G.-Lewin-Séré [09]).
Soit $\Lambda > 0$, $\alpha \geq 0$ *et* $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$. *On note*

$$Z = \int_{\mathbb{R}^3} \nu.$$

Il existe deux valeurs $q_m \in [-\infty, +\infty[$ *et* $q_M \in [q_m, +\infty]$ *telles que le problème de minimisation* $\mathcal{E}_{rBDF}(q)$ *a un minimiseur* Q_q^ν *si et seulement si*

$$q_m \leq q \leq q_M.$$

Dans ce cas, l'opérateur Q_q^ν est solution des équations auto-consistantes

$$Q_q^\nu = \chi_{]-\infty,\mu[}\Big(D_{Q_q^\nu}\Big) - \mathcal{P}^0 + \delta,$$
$$D_{Q_q^\nu} = \mathcal{D}^0 + \alpha\Big(\rho_{Q_q^\nu} - \nu\Big) \star \frac{1}{|\cdot|}.$$

où $\mu \in [-1, 1]$ *et* δ *est un opérateur tel que* $\mathrm{Im}(\delta) \subset \mathrm{Ker}(D_{Q_q^\nu} - \mu I)$.

De plus, si Q^ν désigne un minimiseur global de E_{rBDF} sur $\mathcal{Q}^\Lambda$, alors

$$\Big(Z, \mathrm{tr}_{P^0}(Q^\nu)\Big) \in [q_m, q_M].$$

2. Ionisation dans le cas d'un cut-off ultraviolet régulier

Afin d'avoir un cut-off ultra-violet plus régulier, on remplace l'opérateur de Dirac D^0 par l'opérateur D^Λ défini par

$$D^\Lambda = \left(1 - \Lambda^{-2}\Delta\right) D^0,$$

qui est désormais auto-adjoint sur l'espace $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. Le Théorème 1 reste valable pour l'opérateur D^Λ.

Théorème 2 (G.-Lewin-Séré [09]).
Il existe deux constantes positives K_1 et K_2, qui dépendent de α, Λ, Z et $\|\nu\|_{\mathcal{C}}$, telles que les nombres q_m et q_M, associés à l'opérateur D^Λ, vérifient

$$-K_1 \leq q_m \leq 0 \text{ et } Z \leq q_M \leq 2Z + K_2.$$

De plus,

$$K_1 \to 0 \text{ et } K_2 \to 0,$$

lorsque $\alpha \to 0$ et $\Lambda \to +\infty$ de sorte que $\alpha \log \Lambda \to 0$.

3. Renormalisation de la charge

Théorème 3 (G.-Lewin-Séré [09]).
Soit Q_q^ν, un minimiseur du problème de minimisation $\mathcal{E}_{rBDF}(q)$ pour $q_m \leq q \leq q_M$. L'opérateur Q_q^ν n'appartient pas à $\mathfrak{S}_1(\mathcal{H}^\Lambda)$.

Par contre, la densité de charges $\rho_{Q_q^\nu}$ est définie de manière unique, appartient à $L^1(\mathbb{R}^3)$, et vérifie

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q^\nu} - Z = \frac{q - Z}{1 + \alpha B_\Lambda},$$

où

$$B_\Lambda = \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\Lambda}{\sqrt{1+\Lambda^2}}} \frac{z^2 - z^4/3}{1 - z^2} dz = \frac{2}{3\pi} \log \Lambda + \mathcal{O}(1).$$

La constante de structure fine physique α_{ph}, qui décrit les intéractions électrostatiques réelles, vaut

$$\alpha_{ph} = \frac{\alpha}{1 + \alpha B_\Lambda}.$$

Elle est différente de la constante de structure fine nue α.

À la limite $\Lambda \to +\infty$,

$$\alpha_{ph} \to 0.$$

La renormalisation perturbative de la charge consiste à introduire une constante Z_3 telle que

$$\alpha_{ph} = Z_3 \alpha,$$

puis à montrer que la densité de charge renormalisée ρ_{ph} définie par

$$\alpha_{ph}\rho_{ph} = \alpha\Big(\nu - \rho_{Q_q^\nu}\Big),$$

admet un développement asymptotique indépendant de Z_3 à la limite $\alpha_{ph} \to 0$ (Z_3 étant fixée).

4. Développement perturbatif de la densité du vide polarisé

Lorsque $\alpha\|\nu\|_{\mathcal{C}}$ est suffisamment petit, le vide polarisé Q^ν est solution de

$$Q^\nu = \chi_{]-\infty,0[}\Big(\Pi_\Lambda(D^0+\alpha\varphi)\Pi_\Lambda\Big) - \chi_{]-\infty,0[}\Big(\Pi_\Lambda D^0\Pi_\Lambda\Big),$$

où $\varphi = (\rho_{Q^\nu}-\nu)\star|\cdot|^{-1}$ et Π_Λ est défini par

$$\forall f\in L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{C}^4), \widehat{\Pi_\Lambda f} = \hat{f}1_{|B(0,\Lambda)}.$$

Par la formule de Cauchy, ceci s'écrit aussi

$$\begin{aligned} Q^\nu &= -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{\Pi_\Lambda(D^0+\alpha\varphi+i\eta)\Pi_\Lambda}-\frac{1}{\Pi_\Lambda(D^0+i\eta)\Pi_\Lambda}\right)d\eta \\ &= -\frac{1}{2\pi}\sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n\alpha^n\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{D^0+i\eta}\left(\Big(\Pi_\Lambda\varphi\Pi_\Lambda\Big)\frac{1}{D^0+i\eta}\right)^n d\eta, \end{aligned}$$

lorsque α est suffisamment petit.

La densité du vide polarisé ρ_{Q^ν} se développe de même sous la forme

$$\widehat{\rho_{Q^\nu}}(k) = -\alpha B_\Lambda(k)(\widehat{\rho_{Q^\nu}}(k) - \widehat{\nu}(k)) + \sum_{j=1}^{+\infty} \alpha^{2j+1} [F^\Lambda_{2j+1} \widehat{(\rho_{Q^\nu} - \nu)}](k),$$

où le multiplicateur B_Λ est défini par

$$B_\Lambda(k) = B_\Lambda - U_\Lambda(k) = \frac{1}{\pi} \int_0^{Z_\Lambda(|k|)} \frac{z^2 - z^4/3}{(1-z^2)\left(1 + |k|^2(1-z^2)/4\right)} dz$$
$$+ \frac{|k|}{2\pi} \int_0^{Z_\Lambda(|k|)} \frac{z - z^3/3}{\sqrt{1+\Lambda^2} - |k|z/2} dz,$$

où $Z_\Lambda(r) = (\sqrt{1+\Lambda^2} - \sqrt{1+(\Lambda-r)^2})/r$.

La densité renormalisée ρ_{ph} satisfait l'équation

$$(1 - \alpha_{ph} U_\Lambda(k))\widehat{\rho_{ph}}(k) - \sum_{j=1}^{+\infty} \alpha_{ph}^{2j+1} [F_{2j+1}^\Lambda \widehat{(\rho_{ph})}](k) = \widehat{\Pi_\Lambda \nu}(k).$$

Elle se développe sous la forme

$$\rho_{ph} = \sum_{n \geq 0} (\alpha_{ph})^n \nu_n^\Lambda,$$

lorsque $\alpha_{ph} \to 0$, où la suite $(\nu_n^\Lambda)_{n \geq 0}$ vérifie

$$\begin{aligned}
\nu_0^\Lambda &= \Pi_\Lambda \nu, \\
\nu_1^\Lambda &= \mathcal{U}_\Lambda \nu_0^\Lambda, \\
\nu_n^\Lambda &= \mathcal{U}_\Lambda \nu_{n-1}^\Lambda + \sum_{j=1}^{+\infty} \sum_{\substack{n_1 + \cdots + n_{2j+1} \\ = n-2j-1}} \mathcal{F}_{2j+1}^\Lambda(\nu_{n_1}^\Lambda, \cdots, \nu_{n_{2j+1}}^\Lambda).
\end{aligned}$$

Les opérateurs $\mathcal{U}^\Lambda$ et $\mathcal{F}_{2j+1}^\Lambda$ possèdent des limites $\mathcal{U}$ et $\mathcal{F}_{2j+1}$ lorsque $\Lambda \to +\infty$, de sorte que l'on peut définir une suite limite $(\nu_n)_{n\geq 0}$ par

$$\begin{aligned}
\nu_0 &= \nu, \\
\nu_1 &= \mathcal{U}\nu_0, \\
\nu_n &= \mathcal{U}\nu_{n-1} + \sum_{j=1}^{+\infty} \sum_{\substack{n_1+\cdots+n_{2j+1} \\ =n-2j-1}} \mathcal{F}_{2j+1}(\nu_{n_1}, \cdots, \nu_{n_{2j+1}}).
\end{aligned}$$

Le potentiel créé par la densité ν_1 est le potentiel d'Uehling défini par

$$\nu_1 \star \frac{1}{|\cdot|}(x) = \frac{1}{3\pi}\int_1^{+\infty}(t^2-1)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{t^2}+\frac{1}{t^4}\right)\left(\int_{\mathbb{R}^3} e^{-2|x-y|t}\frac{\nu(y)}{|x-y|}dy\right)dt.$$

Théorème 4 (G.-Lewin-Séré [10]).
Soit $d \geq 0$ *et* $\nu \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}(\mathbb{R}^3)$ *tels que*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \log(1+|k|)^{2d+2} |\widehat{\nu}(k)|^2 dk < +\infty.$$

Quel que soit $0 < \epsilon < 1/2$, *il existe deux constantes* C *et* α_0, *qui ne dépendent que de* d, ϵ *et* ν, *telles que*

$$\left\| \rho_{ph} - \sum_{n=0}^{d} (\alpha_{ph})^n \nu_n \right\|_{L^2 \cap \mathcal{C}} \leq C \alpha_{ph}^{d+1},$$

pour tout $0 \leq \alpha_{ph} \leq \alpha_0$ *et* $\epsilon \leq Z_3 \leq 1 - \epsilon$.

Théorème 5 (G.-Lewin-Séré [10]).
Il existe des constantes universelles A et K telles que

$$\|\nu_n\|_{L^2\cap\mathcal{C}} \leq A^{n+1}\max\Big\{\|(1+\mathcal{U})^n\nu\|_{L^2\cap\mathcal{C}},$$
$$\Big(K\log(n)\Big)^{\frac{n^2}{2}}\|(1+\mathcal{U})^n\nu\|^{n+1}_{L^2\cap\mathcal{C}}\Big\},$$

pour tout $\Lambda \geq 1$ et $n \in \mathbb{N}$.

Cette estimation ne permet pas de déterminer la convergence de la série $\sum_{n\geq 0}(\alpha_{ph})^n\nu_n$ (Cf Dyson [52]).

III. Quelques idées de la preuve du Théorème 1

On note

$$\forall q \in \mathbb{R}, \mathcal{E}^{\nu}_{rBDF}(q) = \min\left\{E_{rBDF}(Q),\ Q \in \mathcal{Q}^{\Lambda} \text{ t.q. } \mathrm{tr}_{P^0}(Q) = q\right\}.$$

1. La condition de type Hunziker-van Winter-Zhislin

Lemme 1 (Hainzl-Lewin-Séré [09]).
On a l'estimation

$$|q| - \frac{\alpha}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\nu(x)\nu(y)}{|x-y|}dxdy \leq \mathcal{E}^{\nu}_{rBDF}(q) \leq |q|.$$

La condition de type HVZ s'écrit

$$\forall q' \neq q, \mathcal{E}^{\nu}(q) < \mathcal{E}^{\nu}(q') + |q-q'|.$$

2. La caractérisation de q_m et q_M

Soit

$$\forall q \in \mathbb{R}, f^{\pm}(q) = \mathcal{E}^{\nu}_{rBDF}(q) \pm q.$$

Lemme 2.
Les fonctions $f^{\pm}$ sont convexes, monotones et vérifient

$$\lim_{q \to \pm\infty} f^{\pm}(q) = \pm\infty.$$

Les nombres q_m et q_M sont définis de sorte que f^{+} est constante sur $]-\infty, q_m]$, resp. f^{-} est constante sur $[q_M, +\infty[$.
Pour chaque valeur $q \in [q_m, q_M]$, le problème de minimisation possède un minimiseur Q^{ν}_{q}.

3. Le minimiseur global Q^ν

Lemme 3.
Il existe un unique $q_0 \in [q_m, q_M]$ tel qu'un minimiseur global Q^ν de E^ν_{rBDF} sur $\mathcal{Q}^\Lambda$ vérifie

$$\mathrm{tr}_{P^0}(Q^\nu) = q_0.$$

4. Le caractère intégrable de la densité $\rho_{Q^\nu_q}$

Lemme 4.
Soit $q \in [q_m, q_M]$. La densité $\rho_{Q^\nu_q}$ associée à un minimiseur du problème de minimisation $\mathcal{E}_{rBDF}(q)$ appartient à $L^1(\mathbb{R}^3)$. Ceci implique que

$$Z \in [q_m, q_M].$$

Problèmes ouverts

1. Étendre ces résultats au modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock non réduit.

2. Introduire les champs électromagnétiques dus aux photons.