Fermions libres et processus ponctuels α-déterminantaux

Barbara Pascal

Groupe de lecture processus ponctuels déterminantaux

Systèmes de N particules en mécanique quantique

Axiomes de la mécanique quantiques

- Espace des états : hilbertien

  vecteur $|\Psi\rangle$ ou fonctions d'ondes Ψ

- Évolution temporelle : équation de Schrödinger

  $$\text{Hamiltonien } \mathcal{H}|\Psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle$$

- Mécanisme de mesure : réduction du paquet d'onde

  diagonalisation : $\mathcal{H}|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle \quad \Longrightarrow \quad$ mesure $\langle\phi_k|\Psi\rangle$

$\longrightarrow$ suffisant pour décrire N particules ***distinctes***

Système de particules identiques *indiscernables*

Fonction d'onde à N particules

$$d\mathcal{P}(\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{X}_N = \boldsymbol{x}_N) = |\Psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N)|^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_1 \cdots \boldsymbol{x}_N$$

Opérateur de permutation de particules

$$\mathbf{P}_{i,j}\Psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_i, \ldots, \boldsymbol{x}_j, \ldots, \boldsymbol{x}_N) = \Psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_j, \ldots, \boldsymbol{x}_i, \ldots, \boldsymbol{x}_N)$$

Postulat de la mécanique quantique :

Les fonctions d'ondes acceptables vérifient

$$\mathbf{P}_{i,j}\Psi = \varepsilon\Psi$$

avec $\varepsilon = 1$*, caractérisant les bosons, ou* $\varepsilon = -1$ *pour les fermions.*

bosons	fermions
Ψ symétrique	Ψ antisymétrique

Fonctions d'onde bosoniques et fermioniques

Diagonalisation du Hamiltonien : $\mathcal{H}|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle$

$\longrightarrow$ états disponibles pour une particule : $\{|\phi_k\rangle\}_k$

Soit $J = \{k_1, \ldots, k_N\} \subset \mathbb{N}$ les indices des états occupés et

$$\boldsymbol{A}_J(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N) \triangleq \begin{pmatrix} \phi_{k_1}(\boldsymbol{x}_1) & \ldots & \phi_{k_1}(\boldsymbol{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{k_N}(\boldsymbol{x}_1) & \ldots & \phi_{k_N}(\boldsymbol{x}_N) \end{pmatrix}$$

Fonctions d'onde à N particules :

bosons	fermions
Ψ symétrique	Ψ antisymétrique
$\propto \mathrm{per}(\boldsymbol{A}_J(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N))$	$\propto \det(\boldsymbol{A}_J(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N))$
$\rightarrow$ permanent	$\rightarrow$ déterminant

Généralisation : α-déterminant

Définition :
For an $N \times N$ matrix, $\boldsymbol{A} = (A_{i,j})_{1 \leq i,j \leq N}$

$$\mathrm{det}_\alpha \boldsymbol{A} = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \alpha^{N-m(\sigma)} A_{\sigma(1)1} \cdots A_{\sigma(N)N}$$

avec

- $\mathcal{S}_N$ l'ensemble des permutations de $\{1, \ldots, N\}$,
- $m(\sigma)$ le nombre de cycles disjoints de la permutation σ.

Cas particuliers :

- $\alpha = -1$: déterminant
- $\alpha = \quad 1$: permanent
- $\alpha = \quad 0$: $\mathrm{det}_0 \boldsymbol{A} = A_{11} \cdots A_{NN}$

$-1 \leq \alpha \leq 1$ famille paramétrique allant des fermions aux bosons

Processus α-déterminantaux

Définition :
Un processus ponctuel est dit *α-déterminantal* si

- $\exists \alpha \in \mathbb{R}$
- $\exists K$ un noyau

tels que

$$\forall n, \quad \rho_n(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n) = \det_{\substack{\alpha \\ 1 \leq i,j \leq n}} K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

/!\ α et K arbitraires ne définissent pas nécessairement un PP ! /!\

Exemple : $\alpha = 0 \Longrightarrow$ processus de Poisson d'intensité $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$

Processus α-déterminantaux

Cas d'intérêt : $\alpha < 0$

Proposition : Si

- $-1/\alpha \in \mathbb{N}$,
- K est auto-adjoint,
- $0 \leq K \leq -1/\alpha$

alors le processus α-déterminantal de noyau K existe.

Ses fonctions de corrélation à n points s'écrivent

$$\forall n, \quad \rho_n(\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n) = \operatorname*{det}_{\alpha}{}_{1 \leq i,j \leq n} K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

Remarque : α-DPP $\iff$ union de $-1/\alpha$ i.i.d. DPP de noyau $-\alpha K$.

But : construire un α-DPP à partir d'un modèle de fermions libres.

Fermions libres dans un potentiel harmonique 1D

Potentiel harmonique : $V(x) \propto x^2$

Équation de Schrödinger : $\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{4}\right)\phi_k(x) = \left(k + \frac{1}{2}\right)\phi_k(x)$

Fonctions propres : $\phi_k(x) = h_k(x)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4}}$, $\underbrace{h_k(x) = \frac{(-1)^k}{\sqrt{\sqrt{2\pi}k!}}\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}}\frac{\partial^k}{\partial x^k}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}}_{\text{polynômes de Hermite}}$

$\longrightarrow$ base orthonormale de $L^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}x)$

Fonction d'onde à N fermions :

$$\Psi_{k_1,\ldots,k_N}(x_1,\ldots,x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det_{1\leq i,j\leq N}\phi_{k_i}(x_j)$$

Et soudain paraît le DPP !

Fonctions propres : $\phi_k(x)$ (fonctions de Hermite)

Fonction d'onde à N fermions : $\Psi_{k_1,\ldots,k_N}(x_1,\ldots,x_N) \propto \det_{1\leq i,j\leq N} \phi_{k_i}(x_j)$

Densité de probabilité jointe : $J = \{k_1,\ldots,k_N\} \subset \mathbb{N}$

$$|\Psi_J(x_1,\ldots,x_N)|^2 = \frac{1}{N!} \det_{1\leq i,j\leq N} K_J(x_i,x_j), \quad K_J(x,y) = \sum_{k\in J} \overline{\phi_k(x)}\phi_k(y)$$

$\longrightarrow$ noyau de projection sur $\mathrm{Vect}\{\phi_k, k\in J\}$

Fonctions de corrélations à n points :

$$\rho_n(x_1,\ldots,x_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int |\Psi_J(x_1,\ldots,x_N)|^2 \,\mathrm{d}x_{n+1}\ldots\mathrm{d}x_N$$
$$= \det_{1\leq i,j\leq n} K_J(x_i,x_j)$$

État fondamental et Ensemble Gaussien Unitaire

Énergie minimale de N fermions :

$$E = E_0 + \cdots + E_{N-1} = \left(0 + \frac{1}{2}\right) + \left(1 + \frac{1}{2}\right) + \cdots + \left(N - 1 + \frac{1}{2}\right)$$

$\longrightarrow$ exactement un fermion par niveau d'énergie

État fondamental : $J = \{0, \cdots, N-1\}$

DPP de noyau $K_J(x,y) = \sum_{k=0}^{N-1} \overline{\phi_k}(x)\phi_k(y)$ **G**aussian **U**nitary **E**nsemble

Formule de *Christoffel-Darboux* :

$$K_J(x,y) = \sqrt{N}\frac{\overline{\phi_N}(x)\phi_{N-1}(y) - \overline{\phi_{N-1}}(x)\phi_N(y)}{x-y}$$

Principe de correspondance et passage à l'échelle

« Le comportement d'un système décrit par la théorie *quantique* coïncide avec la théorie *classique* dans la limite des **grands nombres quantiques**, i.e., des hautes énergies ou des grands nombres de particules. »

Pour un grand nombre N de fermions :

$$\rho_1(x) = K_J(x,x) \underset{N\to+\infty}{\sim} \frac{1}{2\pi}\sqrt{(4N-x^2)_+}$$

(développement de *Plancherel-Rotach* des polynômes de Hermite)

À l'intérieur du domaine :

$$\lim_{N\to+\infty} \frac{1}{\rho_1(0)} K_J\left(\frac{x}{\rho_1(0)}, \frac{y}{\rho_1(0)}\right) = \frac{\sin\left(\pi(x-y)\right)}{\pi(x-y)}$$

État fondamental $\xrightarrow[N\to+\infty]{}$ DPP à noyau *sinus* invariant par translation

États excités par « blocs »

Définition : Un état excité est appelé un « bloc » s'il est composé de N fermions occupant N niveaux consécutifs, i.e.,

$$J_a = \left\{ a^2 M, a^2 M + 1, \ldots, (a+1)^2 M - 1 \right\}, \quad N = |J_a| = (2a+1)M.$$

L'ensemble des « blocs » est paramétré par $a \geq 0$.

Fermions du « bloc » J_a forment un DPP de noyau

$$\begin{aligned} K_{J_a}(x,y) &= \sum_{k=a^2 M}^{(a+1)^2 M - 1} \overline{\phi_k}(x) \phi_k(y) \\ &= \underbrace{\sum_{k=0}^{(a+1)^2 M - 1} \overline{\phi_k}(x) \phi_k(y)}_{\text{GUE à } (a+1)^2 M \text{ fermions}} - \underbrace{\sum_{k=0}^{a^2 M - 1} \overline{\phi_k}(x) \phi_k(y)}_{\text{GUE à } a^2 M \text{ fermions}} \end{aligned}$$

Passage à l'échelle $M \to +\infty$

Grand nombre de fermions

$$K_{J_a}(x,y) \overset{\text{Christoffel-Darboux}}{=}$$

$$\sqrt{(a+1)^2 M}\,\frac{\overline{\phi_{(a+1)^2M}}(x)\phi_{(a+1)^2M-1}(y) - \overline{\phi_{(a+1)^2M-1}}(x)\phi_{(a+1)^2M}(y)}{x-y}$$

$$-\sqrt{a^2 M}\,\frac{\overline{\phi_{a^2M}}(x)\phi_{a^2M-1}(y) - \overline{\phi_{a^2M-1}}(x)\phi_{a^2M}(y)}{x-y}$$

Fonction à un point : $\rho_1(x)$

$$K_{J_a}(x,x) \underset{M\to+\infty}{\overset{\text{Plancherel-Rotach}}{\sim}} \frac{1}{2\pi}\left(\sqrt{(4(a+1)^2M - x^2)_+} - \sqrt{(4a^2M - x^2)_+}\right)$$

$\longrightarrow$ concentrée entre $\pm 2(a+1)\sqrt{M}$

Passage à l'échelle $M \to +\infty$

Noyau dans l'intérieur du domaine :

$$\lim_{M\to+\infty} \frac{1}{\rho_1(0)} K_{J_a}\left(\frac{x}{\rho_1(0)}, \frac{y}{\rho_1(0)}\right) = k_a(x-y)$$

avec

$$k_a(x-y) = \frac{\sin\left(\pi(a+1)(x-y)\right)}{\pi(x-y)} - \frac{\sin\left(\pi a(x-y)\right)}{\pi(x-y)}$$

Factorisation du sinus :

$$k_a(x-y) \overset{\text{trigonométrie}}{=} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(x-y)\right)}{\frac{\pi}{2}(x-y)} \cos\left(\omega_a(x-y)\right), \quad \omega_a = \pi\left(a+\frac{1}{2}\right)$$

Fonctions de corrélations à n points

Définition : $\widetilde{\rho}_n(x_1,\dots,x_n) \triangleq \lim_{M\to+\infty} \frac{1}{\rho_1(0)^n}\rho_n\left(\frac{x_1}{\rho_1(0)},\dots,\frac{x_n}{\rho_1(0)}\right)$

Exemple : $n=2$ $\qquad x_{12} \triangleq x_1 - x_2$

$$\widetilde{\rho}_2(x_1,x_2) = 1 - \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_{12}\right)}{\frac{\pi}{2}x_{12}}\right)^2 \cos^2\left(\omega_a x_{12}\right)$$

Lorsque $a \to +\infty$,

$$\cos^2\left(\omega_a x_{12}\right) = \frac{1+\cos(2\omega_a x_{12})}{2}, \quad \omega_a = \pi\left(a+\frac{1}{2}\right)$$

oscille très rapidement autour de sa moyenne $1/2$.

$$\lim_{a\to+\infty} \widetilde{\rho}_2(x_1,x_2) = 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_{12}\right)}{\frac{\pi}{2}x_{12}}\right)^2$$

au sens *faible* de l'intégration sur les compacts

Fonctions de corrélations à n points

Exemple : $n = 3$ $\qquad x_{ij} \triangleq x_i - x_j,\ i,j \in \{1,2,3\}$

$$\widetilde{\rho}_3(x_1,x_2,x_3) = \begin{vmatrix} 1 & k_a(x_{12}) & k_a(x_{13}) \\ k_a(x_{21}) & 1 & k_a(x_{23}) \\ k_a(x_{31}) & k_a(x_{32}) & 1 \end{vmatrix}$$

$$= 1 \times \left(1 - k_a(x_{23})^2\right) - k_a(x_{12}) \times \left(k_a(x_{21}) - k_a(x_{31})k_a(x_{23})\right)$$
$$+ k_a(x_{13}) \times \left(k_a(x_{21})k_a(x_{32}) - k_a(x_{31})\right)$$

Noyau : $k_a(x_i - x_j) = k_a(x_{ij}) = \dfrac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_{ij}\right)}{\frac{\pi}{2}x_{ij}} \cos\left(\omega_a x_{ij}\right)$

Fonction de corrélation à 3 points

$$\widetilde{\rho}_3(x_1,x_2,x_3) = 1 - \sum_{\bullet=\{12,23,13\}} \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}\right)^2 \cos^2\left(\omega_a x_\bullet\right)$$
$$+ 2 \prod_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet} \cos\left(\omega_a x_\bullet\right)$$

Fonctions de corrélations à n points

Fonction de corrélation à 3 points

$$\widetilde{\rho}_3(x_1,x_2,x_3) = 1 - \sum_{\bullet=\{12,23,13\}} \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}\right)^2 \cos^2\left(\omega_a x_\bullet\right) + 2 \prod_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet} \cos\left(\omega_a x_\bullet\right)$$

$$\forall \bullet \in \{12,23,13\}, \quad \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}\right)^2 \cos^2\left(\omega_a x_\bullet\right) \underset{a\to+\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2}\left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}\right)^2$$

Un zeste de trigonométrie ... $\cos(\omega_a x_{12})\cos(\omega_a x_{23})\cos(\omega_a x_{13}) =$ $\cos^2(\omega_a x_1)\cos^2(\omega_a x_2)\cos^2(\omega_a x_3) + \sin^2(\omega_a x_1)\sin^2(\omega_a x_2)\sin^2(\omega_a x_3) + (\dots)$ avec $(\dots)$ de moyenne nulle.

Fonctions de corrélations à n points

$$\widetilde{\rho}_3(x_1, x_2, x_3) = 1 - \sum_{\bullet=\{12,23,13\}} \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2} x_\bullet} \right)^2 \cos^2\left(\omega_a x_\bullet\right)$$

$$+ 2 \prod_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2} x_\bullet} \cos\left(\omega_a x_\bullet\right)$$

Passage à l'échelle : $\lim_{a\to+\infty} \widetilde{\rho}_3(x_1, x_2, x_3)$

$$= 1 - \sum_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{1}{2} \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2} x_\bullet} \right)^2 + \frac{1}{2} \prod_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2} x_\bullet}$$

au sens *faible* de l'intégration sur les compacts

Lien avec le 1/2-déterminant

$$\lim_{a\to+\infty} \widetilde{\rho}_2(x_1,x_2) \quad = 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_{12}\right)}{\frac{\pi}{2}x_{12}}\right)^2$$

$$\lim_{a\to+\infty} \widetilde{\rho}_3(x_1,x_2,x_3) =$$

$$1 - \sum_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{1}{2}\left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}\right)^2 + \frac{1}{2}\prod_{\bullet=\{12,23,13\}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x_\bullet\right)}{\frac{\pi}{2}x_\bullet}$$

Rappel : $\det_{-1/2} \underset{1\le i,j\le n}{} k_a(x_i - x_j) \triangleq \sum_{\sigma\in\mathcal{S}_n} \left(-\frac{1}{2}\right)^{n-m(\sigma)} \prod_{i=1}^{n} k_a(x_i - x_{\sigma(i)})$

Fonction à $n = 2$ points

- Pour une transposition $m(\sigma) = 1$, $n - m(\sigma) = 1$: facteur $-1/2$

Fonction à $n = 3$ points

- Pour une transposition $m(\sigma) = 2$, $n - m(\sigma) = 1$: facteur $-1/2$
- Pour un cycle $m(\sigma) = 1$, $n - m(\sigma) = 2$: facteur $1/4$

Fonctions de corrélations à n points - Cas générique

≪ Bloc ≫ de fermions : processus *déterminantal*

$$\widetilde{\rho}_n(x_1,\ldots,x_n) = \sum_{\sigma\in\mathcal{S}_n} (-1)^{n-m(\sigma)} \prod_{i=1}^{n} \frac{\sin\frac{\pi}{2}\left(x_i - x_{\sigma(i)}\right)}{\frac{\pi}{2}\left(x_i - x_{\sigma(i)}\right)} \prod_{i=1}^{n} \cos\omega_a\left(x_i - x_{\sigma(i)}\right)$$

Passage à l'échelle $a \to +\infty$:

$$\lim_{a\to+\infty} \prod_{i=1}^{n} \cos\omega_a\left(x_i - x_{\sigma(i)}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)^{n-m(\sigma)}$$

Processus $-1/2$-déterminantal :
Pour toute fonction f bornée, mesurable, à support compact

$$\begin{aligned}\lim_{a\to+\infty} \int \det_{1\leq i,j\leq n} k_a(x_i-x_j) f(x_1,\ldots,x_n)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_n \\ = \int \det_{-1/2\atop 1\leq i,j\leq n} \frac{\sin\frac{\pi}{2}(x_i-x_j)}{\frac{\pi}{2}(x_i-x_j)} f(x_1,\ldots,x_n)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_n\end{aligned}$$

Critère de Kallenberg : convergence faible du processus ponctuel.

Processus α-déterminantal comme passage à l'échelle

Idée :

$$J = \bigcup_{i=1}^{B-1} \{a_j^2 M, \ldots, (a_j + r_j)^2 M - 1\}$$

structure composée de plusieurs « blocs »

Pair	Impair
$\alpha = -1/2B$	$\alpha = -1/(2B-1)$