HAL open science

DIAMAGNETISME DES GAZ QUANTIQUES QUASI-PARFAITS

Baptiste Savoie

To cite this version:

Baptiste Savoie. DIAMAGNETISME DES GAZ QUANTIQUES QUASI-PARFAITS. Physique mathématique [math-ph]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2010. Français. NNT : . tel-00545831v2

HAL Id: tel-00545831

https://theses.hal.science/tel-00545831v2

Submitted on 20 Mar 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE II

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Aix-Marseille II

Spécialité : **Physique Théorique et Mathématiques**

préparée au laboratoire **Centre de Physique Théorique (CPT)**

dans le cadre de l'École Doctorale **Physique et Science de la Matière (ED 352)**

présentée et soutenue publiquement
par

Baptiste Savoie

le 24 Novembre 2010

Titre:

DIAMAGNETISME DES GAZ QUANTIQUES QUASI-PARFAITS

Directeur de thèse: **Pr. Philippe Briet**

Jury

Pr. Valentin Zagrebnov,	Président du jury
Pr. Didier Robert,	Rapporteur
Pr. Gheorghe Nenciu,	Rapporteur
Pr. Horia Cornean,	Examinateur
Pr. Philippe Briet,	Directeur de thèse

Résumé

La majeure partie de cette thèse concerne l'étude de la susceptibilité diamagnétique en champ magnétique nul d'un gaz d'électrons de Bloch à température et densité fixées dans la limite des faibles températures. Pour les électrons libres (i.e. en l'absence de potentiel périodique), la susceptibilité diamagnétique a été calculée par L. Landau en 1930 ; le résultat est connu sous le nom de formule de Landau. Quant au cas des électrons de Bloch, E.R. Peierls montra en 1933 que dans l'approximation des électrons fortement liés, la formule pour la susceptibilité diamagnétique reste la même en remplaçant la masse de l'électron par sa "masse effective" ; ce résultat est connu sous le nom de formule de Landau-Peierls. Depuis, de nombreuses tentatives pour clarifier les hypothèses de validité de la formule de Landau-Peierls ont vu le jour. Le résultat principal de cette thèse établit rigoureusement qu'à température nulle, lorsque la densité d'électrons tend vers zéro, la contribution dominante à la susceptibilité diamagnétique est donné par la formule de Landau-Peierls avec la masse effective de la plus petite bande d'énergie de Bloch.

Abstract

The main part of this thesis deals with the zero-field diamagnetic susceptibility of a Bloch electrons gas at fixed temperature and fixed density in the limit of low temperatures. For a free electrons gas (that is when the periodic potential is zero), the steady diamagnetic susceptibility has been computed by L. Landau in 1930 ; the result is known as Landau formula. As for the Bloch electrons, E.R. Peierls in 1933 showed that under the tight-binding approximation, the formula for the diamagnetic susceptibility remains the same but with the mass of the electron replaced by its "effective mass" ; this result is known as the Landau-Peierls formula. Since, there were very many attempts in order to clarify the assumptions of validity of the Landau-Peierls formula. The main result of this thesis establishes rigorously that at zero temperature, as the density of electrons tends to zero, the leading contribution of the diamagnetic susceptibility is given by the Landau-Peierls formula with the effective mass of the lowest Bloch energy band.

Table des matières

Résumé . . . iii
Abstract . . . iv
Table des matières . . . v

Introduction **1**

1 Systèmes magnétiques **17**
1 Eléments de physique . . . 17
2 Notations et définitions . . . 19
3 Systèmes magnétiques et Hamiltoniens . . . 21
3.1 Modèle & hypothèses . . . 21
3.2 Hamiltonien à une particule . . . 22
3.3 Hamiltonien du gaz quasi-parfait à nombre de particules fixé . . . 26
3.4 Hamiltonien seconde quantifiée : nombre indéterminé de particules . 28
3.5 Lorsque ω devient un paramètre complexe . . . 29
4 Semi-groupe à un paramètre . . . 32
4.1 Définition et propriétés du semi-groupe à un paramètre . . . 32
4.2 Estimations en norme Hilbert-Schmidt et norme trace . . . 33
5 Grandeurs caractéristiques du gaz quantique quasi-parfait . . . 35
5.1 Grandeurs caractéristiques dans l'ensemble grand-canonique . . . 35
5.2 Grandeurs caractéristiques dans l'ensemble canonique . . . 39
6 Annexe . . . 40

2 Réponse magnétique à volume fini **41**
1 Résultats principaux . . . 42
2 Propriétés de la pression grand-canonique à volume fini . . . 43
2.1 Analycité en la fugacité z . . . 44
2.2 Analycité en l'intensité du champ magnétique B . . . 45
2.3 Analycité jointe en la fugacité et en l'intensité du champ magnétique 50
2.4 Convexité en la variable μ . . . 51
2.5 Transfert des propriétés d'analycité . . . 51
3 Susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini . . . 52
4 Appendice 1 : Energie libre et susceptibilités canonique . . . 55
5 Appendice 2 : Grandeurs grand-canonique à densité fixée . . . 58
6 Appendice 3 : Une autre preuve de la Proposition 2.10 . . . 60
7 Annexe . . . 66

3 Etude de quelques noyaux à volume fini et infini **69**
1 Résultats principaux 69
2 Noyau de la résolvante à volume fini et infini 72
2.1 Preuve de la Proposition 3.1 et du Corollaire 3.2 72
2.2 Annexe 76
3 Dérivées spatiales du noyau de la résolvante 82
3.1 Preuve de la Proposition 3.3 84
3.2 Annexe 86
4 Différence des noyaux des résolvantes 90
5 Annexe 92

4 Théories des perturbations magnétiques à volume fini **99**
1 Résultats principaux 99
2 Analycité du noyau intégral de la résolvante à volume fini 104
3 Développement régularisé à volume fini 107
3.1 Préliminaires 107
3.2 Preuve du Théorème 4.2 110
4 Application aux grandeurs grand-canonique à volume fini 113
5 Annexe 120

5 Limites thermodynamiques **123**
1 Résultats principaux 124
2 Quelques mots sur la méthode utilisée 127
2.1 "Sens" pour la limite thermodynamique 127
2.2 Construction des candidats à la limite thermodynamique 127
3 Limite thermodynamique : pression grand-canonique 130
3.1 Preuve du Théorème 5.1 et du Corollaire 5.2 130
3.2 Extensions 134
4 Limite thermodynamique : aimantation grand-canonique 135
5 Limite thermodynamique : susceptibilités grand-canonique 140
5.1 Préliminaires 140
5.2 Preuve du Théorème 5.3 144
5.3 Preuve des Corollaires 5.4 et 5.5 148
5.4 Preuve du Théorème 5.6 et du Corollaire 5.7 149
6 Appendice 1 : limites thermodynamiques à densité fixée 150
6.1 Limites thermodynamiques des grandeurs à densité fixée 151
6.2 Transformée de Legendre de la limite thermodynamique de la pression grand-canonique 154
7 Appendice 2 : limites thermodynamiques pour le modèle d'Anderson 155
7.1 Potentiel type Anderson et opérateurs de Schrödinger aléatoires . . . 156
7.2 Résultats principaux 159
7.3 Preuve du Théorème 5.44 160
8 Appendice 3 : limites thermodynamiques pour le cas $V = 0$ 170
8.1 Limites thermodynamiques 170
8.2 Formules explicites en champ magnétique nul 173
9 Annexe 178

6 Une preuve rigoureuse de la formule de Landau-Peierls 179
1 Résultats principaux 179
2 L'énergie de Fermi des électrons de Bloch 184
2.1 Résultats préparatoires 184
2.2 Preuve du Théorème 6.1 : le cas semi-conducteur (SC) 186
2.3 Preuve du Théorème 6.1 : le cas métallique (M) 190
2.4 Annexe : preuves des résultats intermédiaires 191
3 Susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul, à température positive et à densité fixées 193
3.1 Expression générale 193
3.2 Preuve du Théorème 6.17 195
3.3 Annexe : preuves des résultats intermédiaires 198
4 Susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul, à température nulle et à densité fixée 202
4.1 Cas des semi-conducteurs (SC) - Preuve de (i) Théorème 6.4 202
4.2 Cas métallique (M) - Preuve de (ii) Théorème 6.4 203
4.3 Annexe - Preuve Proposition 6.28 206
5 Approximation de Landau-Peierls 207
5.1 Preuve de (iii) Théorème 6.4 208
5.2 Annexe - Preuves des résultats intermédiaires 210
6 Appendice : Quelques résultats techniques 213
6.1 Formulation du résultat principal 213
6.2 Un résultat technique important 215
6.3 Preuve du Théorème 6.32 219
6.4 Annexe 229

Bibliographie 233

Introduction

Historique et position des problèmes

Comprendre, décrire et classifier les comportements de la matière en présence de champs magnétiques ont été incontestablement l'un des moteurs de l'évolution des concepts et des formalismes que la physique théorique a connu dans les deux siècles derniers. Les origines des deux principales formes du magnétisme que sont *le paramagnétisme* et *le diamagnétisme* ne seront comprises qu'en 1930 avec l'émergence de la mécanique quantique. Cependant les modèles théoriques décrivant les effets diamagnétiques dans les métaux restent encore aujourd'hui discutables.

Les premières expériences connues mettant en évidence une des formes du magnétisme, que le physicien anglais M. Faraday nommera en 1845 *le diamagnétisme*, remontent à la fin du XVIIIème siècle. En 1778, le physicien hollandais A. Brugmans observe la répulsion du bismuth par les deux pôles d'un aimant. En 1827, le physicien français A.C.M. Le Baillif publie un papier sur la répulsion magnétique du bismuth et de l'antimoine. En 1828, le physicien allemand T.J. Seebeck décrit le même effet pour de nombreuses substances.

Les travaux réalisés en 1845 par M. Faraday ont été déterminants puisqu'ils vont être à l'origine d'une théorie macroscopique du magnétisme. N'ayant vraisemblablement pas eu connaissance des observations antérieures, il observe qu'un morceau de verre lourd accroché entre les pôles d'un électroaimant s'aligne perpendiculairement aux ligne de champs de l'aimant. Ce comportement diffère de celui déjà bien connu qu'ont certains matériaux (par ex. un aimant) qui sont attirés vers les régions de plus fort champ magnétique en s'orientant parallèlement aux lignes de champs. La découverte surprenante de Faraday est que pour des champs magnétiques suffisamment fort, pratiquement tous les objets matériels sont repoussés vers les régions de plus faible champ magnétique en s'orientant perpendiculairement aux lignes de champs. Il donne le nom de *diamagnétisme* à ce nouveau phénomène en opposition au phénomène déjà connu qu'il nomme *paramagnétisme*. Ces travaux laissent déjà entrevoir que le magnétisme est une *propriété intrinsèque* à la matière.

Dans le cadre de la théorie classique de l'électromagnétisme, publiée par le physicien écossais J.C. Maxwell en 1864, on distingue deux formes de magnétisme que l'on caractérise de la manière suivante. Lorsqu'un milieu matériel à l'équilibre thermique et initialement non aimanté est soumis à un champ magnétique extérieur $\mathbf{B}$ stationnaire, il acquiert (en réaction) une aimantation (ou moment magnétique moyen par unité de volume). Cela se traduit par un vecteur aimantation qui est fonction du champ magnétique dans le matériau $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{B})$. Pour un matériau supposé linéaire, homogène et isotrope, la relation locale

entre $\mathbf{M}$ et $\mathbf{B}$ est linéaire et pour de faibles intensité du champ magnétique :

$$\mathbf{M} = \chi_{\mathrm{m}}\mathbf{B} \qquad \text{unités CGS}$$

χ_{m} est une quantité sans dimension, indépendante de $\mathbf{B}$ appelée susceptibilité magnétique par unité de volume. Suivant le signe de χ_{m}, les matériaux se classent en deux familles : les matériaux diamagnétiques pour lesquels $\chi_{\mathrm{m}} < 0$ et les matériaux paramagnétiques[1] pour lesquels $\chi_{\mathrm{m}} > 0$.

Les travaux de M. Faraday suggèrent que la diamagnétisme est un phénomène présent dans presque tous les matériaux. Si un tel matériau manifeste le phénomène de paramagnétisme pour de faibles champs magnétiques, les effet paramagnétiques qui sont prédominants se superposent aux effets diamagnétiques. La susceptibilité magnétique χ_{m} peut alors se décomposer en une contribution paramagnétique et diamagnétique :

$$\chi_{\mathrm{m}} = \chi_{\mathrm{para}} + \chi_{\mathrm{dia}}$$

Suite à la découverte de l'électron par le physicien anglais J.J. Thomson en 1897, le physicien allemand P. Drude adapte à l'aube du XXième siècle la théorie cinétique des gaz (initié par J.C. Maxwell) aux électrons des métaux. Dans cette théorie classique des solides (essentiellement des métaux en fait), seule une interprétation *heurisitique* du phénomène de diamagnétisme peut être apportée. En réaction à l'application d'un champ magnétique extérieur, les électrons se trouvant à l'intérieur d'un métal se mettent en mouvement. Il se crée alors un courant induit et par suite un champ magnétique induit conforme à la loi de Lenz, i.e. qui s'oppose au champ magnétique extérieur. Le moment magnétique associé à ce courant est un moment diamagnétique. Quant au phénomène de paramagnétisme, la nature des moments magnétiques induits par le champ magnétique est sans réponse.

C'est l'émergence de la physique statistique d'équilibre (application de la théorie des probabilités à l'étude des comportements thermodynamiques des systèmes composés d'un grand nombre de particules) initié en 1870 par le physicien autricihien L. Boltzmann puis formalisée par le physicien américain W. Gibbs en 1902, qui va donner un premier cadre qualitatif à l'étude statistique du diamagnétisme et paramagnétisme.

En 1905 le physicien français P. Langevin propose une explication théorique du paramagnétisme dans le cadre de la physique statistique dite "semi-classique". Son modèle est un gaz d'électrons (vus comme des particules "classiques") portant un moment magnétique permanent et ayant un mouvement sur une orbite implicitement *privilégiée* sous l'effet d'un champ magnétique uniforme. En dehors du domaine des basses température, P. Langevin retrouve qualitativement les résultats expérimentaux publiés en 1895 par le physicien français P. Curie : la susceptibilité paramagnétique des matériaux varie inversement proportionnel à la température, i.e. $\chi_{\mathrm{para}} = \chi_{\mathrm{para}}(T) = C/T$ où T désigne la température et C la constante de Curie (intrinèque au matériau). L'interprétation que donne P. Langevin est la suivante : les matériaux seraient formés d'une multitude de micro-aimants créés par des électrons en mouvement sur une orbite fermée. En l'absence de champ magnétique ces moments magnétiques seraient aléatoirement orientés et leur somme serait nulle à l'échelle

[1] Il existe une sous-classification (découverte au XXème siècle) pour les matériaux paramagnétiques (ferromagnétiques, ferrimagnétiques et antiferromagnétiques) dont nous ne parlerons pas ici.

macroscopique. En présence de champ magnétique, ces moments s'aligneraient dans le même sens que le champ magnétique mais l'agitation thermique tendrait à leur donner une direction aléatoire. Dans le domaine des basses températures, il montre que l'aimantation paramagnétique tend vers une constante. Il propose également un modèle semi-classique pour le phénomène de diamagnétisme dont on reviendra dessus un peu plus loin.

En 1911 la physicienne hollandaise J.H. Van Leuven montre que l'étude des phénomènes de paramagnétisme et diamagnétisme (le modèle utilisé est un système de particules chargées placées dans un champ magnétique stationnaire et à équilibre thermique) dans le cadre de la physique statistique classique mène au résultat suivant : le paramagnétisme et le diamagnétisme se compensent toujours exactement et l'aimantation résultante d'un système classique est *toujours nulle*. Ce résultat laisse entrevoir que les origines des effets diamagnétiques et paramagnétiques ne peuvent être que quantiques.

De l'émergence de la théorie des quantas au début du XXème siècle (initié par M. Planck, A. Einstein puis N. Bohr) et des découvertes successives du noyau atomique (par E. Rutherford en 1911) et du spin de l'électron (par O. Stern et W. Gerlach en 1922) résultent le développement de la mécanique quantique entre les années 1920 et 1930 par les travaux de E. Schrödinger, W.K. Heisenberg et P.A. Dirac principalement. Pour tenir compte de l'indiscernabilité au niveau quantique des particules, la distribution classique de Maxwell-Boltzmann utilisée alors en physique statistique classique (et semi-classique) est remplacée par les distributions de Bose-Einstein pour les systèmes de particules de spin entier (bosons) et de Fermi-Dirac pour les systèmes de particules de spin demi-entier (fermions). La distribution de Fermi-Dirac tient compte du principe d'exclusion de Pauli (postulat fondamental de la mécanique quantique selon lequel deux fermions ne peuvent se trouver dans le même état quantique).

Dans le cadre de la mécanique quantique, les origines des moments magnétiques permanents d'un atome (ou ion) *libre* sont identifiées. Il y a principalement deux origines[2] : le moment magnétique de spin des électrons et le moment magnétique associé à leur moment cinétique orbital (i.e. moment magnétique associé au courant créé par les électrons en mouvement). Suivant les règles de Hund, si l'atome isolé a toutes ses couches d'électrons remplies (les électrons de la dernière couche non vide sont appelés électrons de valence ; les électrons des couches plus "profondes" sont appelés électrons de coeur) alors la somme de ces moments magnétiques est nulle et l'atome n'a pas de moment magnétique permanent. Ainsi la susceptibilité magnétique d'un atome isolé ayant ses couches d'électrons remplies (par exemple un atome de gaz noble comme l'hélium) et sujet à un faible champ magnétique est purement diamagnétique[3] (le seul moment magnétique résulte du mouvement orbital des électrons en réaction au champ magnétique). La théorie des perturbations stationnaires (de Rayleigh-Schrödinger) fournit un modèle théorique (voir [42]) qui redonne le modèle semi-classique proposé par Langevin en 1905 :

$$\chi_{\mathrm{m}} \sim \chi_{\mathrm{dia}}^{\mathrm{atome}} = -\frac{e^2}{6mc^2}\sum_i \langle r_i^2 \rangle \qquad \text{(unités CGS)} \tag{0.1}$$

[2]Il y en a en fait trois si on tient compte du moment magnétique de spin des nucléons (protons et neutrons). En général, cette contribution est faible comparée à la contribution électronique.

[3]La contribution purement paramagnétique à la susceptibilité magnétique d'un atome dont les couches électroniques sont incomplètes se modélise par la formule de Curie-Brillouin (voir [65]).

où $-e$ est la charge de l'électron, m la masse de l'électron, c la célérité de la lumière et $\langle r_i^2 \rangle$ est le carré moyen de la distance du $i$ème électron au noyau.

La connaissance des origines du paramagnétisme et du diamagnétisme pour un atome (ou ion) isolé et l'apparition de modèles théoriques associés conduisent la communauté physicienne à s'intéresser au cas des solides, plus particulièrement les métaux puisqu'ils font déjà l'objet de mesures expérimentales peu avant les années 1930. Les modèles théoriques qui vont naître reposent sur la théorie quantique des solides publiée par le physicien allemand A. Sommerfeld en 1927. Dans cette théorie, les électrons de valence sont supposés être complètement "détachés" des ions (leur fonction d'onde n'est pas localisée et s'étend sur l'ensemble du solide) formant ainsi un gaz parfait d'électrons (dits de conduction) sans interaction (ils sont peu affectés par le réseau).

En toute généralité, la susceptibilité magnétique par unité de volume d'un système (à l'équilibre thermique) constitué d'un grand nombre d'atomes indépendants fixés aux noeuds d'un réseau cristallin (fini) et sujet à un faible champ magnétique uniforme :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{solide}} = \chi_{\mathrm{dia}}^{e^-,\mathrm{coeur}} + \chi_{\mathrm{para}}^{e^-,\mathrm{coeur}} + \chi_{\mathrm{m}}^{e^-,\mathrm{val}} \tag{0.2}$$

où $\chi_{\mathrm{dia}}^{e^-,\mathrm{coeur}}$ (resp. $\chi_{\mathrm{para}}^{e^-,\mathrm{coeur}}$) est la contribution diamagnétique (resp. paramagnétique) des électrons de coeur. $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-,\mathrm{val}}$ est la susceptibilité magnétique des électrons de valence ou de conduction tenant compte : de la contribution paramagnétique liée aux moments magnétiques de spin des électrons, de la contribution diamagnétique liée au mouvement des électrons en réaction au champ magnétique, des éventuelles contributions (paramagnétique et/ou diamagnétique) associées au couplage spin-orbite pour les électrons, et enfin les éventuelles contributions (paramagnétique et/ou diamagnétique) liées aux effets de bords[4].

Entre 1928 et 1933 apparaissent trois modèles dans le cadre de la mécanique statistique quantique permettant d'évaluer l'ordre de grandeur de la susceptibilités magnétique $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-,\mathrm{val}}$ pour les électrons de conduction dans un métal[5] à basse température.

En 1928, le physicien autrichien W.E. Pauli apporte un modèle permettant d'évaluer l'ordre de grandeur de la susceptibilité purement paramagnétique liée aux moments magnétiques de spin des électrons de conduction. Dans [85], il montre que pour un gaz d'électrons libres (obéissant à la statistique de Fermi-Dirac) à densité fixée, fortement dégénéré (i.e. la température $T \to 0$) et sujet à un faible champ magnétique uniforme, la susceptibilité paramagnétique (par unité de volume) est indépendante de T et satifait :

$$\chi_{\mathrm{para}}^{e^-\mathrm{a.s.},\mathrm{cond}} = \chi_{\mathrm{Pauli}} = \frac{e^2 k_F}{4\pi^2 m c^2} \qquad \text{(unités CGS)} \quad \text{a.s.} = \text{avec spin}$$

[4]D'un point de vue semi-classique, les électrons ont une trajectoire hélicoïdale. Ils peuvent donc "heurter les surfaces du solide" modifiant le sens ou amplifiant l'amplitude des courants induits (équivalents à des moments magnétiques).

[5]Le cas d'un isolant (par ex. un diélectrique) est beaucoup plus simple. A basse température, les couches électroniques des atomes sont toutes remplies (y compris celle des électrons de valence). Pour un champ magnétique suffisamment faible, la susceptibilité magnétique par unité de volume (0.2) se réduit à :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{isolant}} = \chi_{\mathrm{dia}}^{e^-,\mathrm{coeur}} + \chi_{\mathrm{dia}}^{e^-,\mathrm{val}} = N_V \chi_{\mathrm{dia}}^{\mathrm{atome}}$$

où N_V est le nombre d'atomes par unité de volume. $\chi_{\mathrm{dia}}^{\mathrm{atome}}$ peut être évaluée par (0.1).

où $-e$ est la charge et m la masse de l'électron, c la célérité de la lumière et $k_F := (3\pi^2\rho)^{\frac{1}{3}}$ avec ρ le nombre d'électrons par unité de volume.

En 1930 le physicien russe L. Landau apporte un modèle permettant d'évaluer l'ordre de grandeur de la susceptibilité magnétique des électrons de conduction en l'absence des effets paramagnétiques liés à leur spin. Dans [70], L. Landau montre que sous l'hypothèse d'un gaz d'électrons libres sans spin (obéissant à la statistique de Fermi-Dirac) à densitée fixée, confiné dans un domaine, fortement dégénéré et sujet à un faible champ magnétique uniforme, la susceptibilité magnétique (par unité de volume) est purement diamagnétique et n'est liée qu'à la quantification des orbites des fermions (niveaux de Landau) :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s,cond}} = \chi_{\mathrm{Landau}} \sim -\frac{1}{3}\chi_{\mathrm{Pauli}} = -\frac{e^2 k_F}{12\pi^2 mc^2} \qquad \text{(unités CGS)} \quad \text{s.s.} = \text{sans spin} \tag{0.3}$$

A noter que L. Landau tient quand même compte dans ses calculs de la dégénerescence liée au spin des électrons de conduction. D'autre part, il suppose que les effets de bords sont négligeables puisque seule une infime fraction des électrons du gaz "voit" les bords du domaine (image semi-classique). Enfin il suggère l'existence d'une autre contribution dont l'amplitude oscille avec l'intensité du champ magnétique[6]. En champ magnétique nul, cette contribution est nulle et $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s,cond}}$ est une quantité intrinsèque au gaz d'électrons libres.

Suite aux résultats de W.E. Pauli et L. Landau, il naît un premier modèle pour la susceptibilité magnétique (par unité de volume) d'un métal sous l'hypothèse de faible température ($T \to 0$) et de faible champ magnétique ($B \to 0$) (en négligeant les contributions éventuelles provenant du couplage spin-orbite pour les électrons de conduction) :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{métal}} = \chi_{\mathrm{dia}}^{e^-,\mathrm{coeur}} + \chi_{\mathrm{m}}^{e^-,\mathrm{cond}}, \quad \chi_{\mathrm{m}}^{e^-,\mathrm{cond}} = \chi_{\mathrm{Pauli}} + \chi_{\mathrm{Landau}} \sim \frac{2}{3}\frac{e^2 k_F}{4\pi^2 mc^2} \qquad \text{(unités CGS)} \tag{0.4}$$

En d'autres termes, le gaz d'électrons de conduction est globalement paramagnétique.
Aux débuts des années 1930, il semble peu envisageable de valider ou d'infirmer ce modèle en le confrontant aux résultats expérimentaux (bien que le sodium métallique ait fait l'objet de nombreuses mesures, voir [25]) vu la difficulté expérimentale de mesurer séparément chacune des contributions apparaissant dans (0.4). En 1931, la susceptibilité de Landau χ_{Landau} est remise en question par E. Teller dans [105], suivi de J.H. Van Vleck dans son ouvrage [107]. Ils suggèrent que les contributions à la susceptibilité magnétique liées aux effets de bords (négligées par L. Landau) doivent être prise en compte car les "électrons de bords" seraient fortement paramagnétiques.

Parallèlement, au début des années 1930, la théorie quantique des solides s'est enrichie des travaux du physicien suisse F. Bloch publiés en 1928 et la théorie des bandes[7] voit le jour. Reposant sur le théorème de Bloch, le modèle des électrons presque libres se substitue au modèle des électrons libres pour traiter les électrons de conduction soumis au potentiel périodique cristallin (appelés électrons de Bloch). Dans ce modèle le potentiel périodique est traité comme une perturbation aux électrons libres. Ceci est justifié par le fait que le mouvement des électrons de conduction est peu affecté par la charge des ions compte-tenu des effets d'écrantage dûs aux électrons de coeur. Un autre modèle très différent est

[6] C'est ce qu'on appelera plus tard l'effet de Haas-Van Alphen mis expérimentalement en évidence la même année en 1930 dans [37], puis dans [98] en 1939.

[7] Cette théorie permet d'expliquer les différences entre isolant, semi-conducteur et métal.

développé : le modèle des liaisons fortes. Au lieu de considérer les électrons de valence, ce sont ce sont les interactions entre les orbitales atomiques qui sont considérées.

En 1933 le physicien allemand R. Peierls apporte un modèle qui étend la théorie de Landau aux électrons de Bloch (les effets paramagnétiques liés à leur spin sont négligés). Dans [87], R. Peierls montre que dans l'approximation des liaisons fortes, la susceptibilité (par unité de volume) magnétique d'un gaz d'électrons de Bloch dans un métal infini, lorsque la température $T \to 0$ et le champ magnétique est faible ($B \to 0$) s'écrit :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}} = \chi_{\mathrm{LP}} + \chi_{\mathrm{m,autre}}, \quad \chi_{\mathrm{LP}} \sim -\frac{e^2 k_F}{12\pi^2 m^* c^2} \quad \text{(unités CGS)} \tag{0.5}$$

χ_{LP} est la susceptibilité diamagnétique de Landau-Peierls[8], m^* est la masse effective de l'électron. $\chi_{\mathrm{m,autre}}$ est une contribution sans signification particulière dont le signe et l'ordre de grandeur ne semblent pas être déterminés.

En 1952, A. Adams est l'un des premiers à remettre en question le développement (0.5). Dans [2], il conteste l'approximation des liaisons fortes, inadaptée aux métaux. Il suggère que $\chi_{\mathrm{m,autre}}$ peut contenir des contributions du même ordre de grandeur que χ_{LP}.

La question de la validité des modèles de Landau et de Peierls ont été à l'origine de nombreux débats entre les physiciens.

Entre 1939 et 1965, la question relative à la nature (paramagnétique et/ou diamagnétique) ainsi qu'aux ordres de grandeur des contributions, liées aux effets de bords, à la susceptibilité purement diamagnétique d'un gaz d'électrons libres confiné dans un domaine a généré de nombreux travaux (parfois contradictoires). Les principaux sont [81], [82], [103], [39], [40], [80], [104], [41], [8], [47], [46], etc... Un bref historique avec une discussion de ces travaux se trouvent dans [4]. Ce problème trouvera une première issue rigoureuse par Angelescu *et al.* en 1975 dans [4]. La susceptibilité magnétique (par unité de volume) d'un gaz d'électrons libres sans spin à densité fixée, confiné dans un domaine parallélépipédique Λ de volume $V(\Lambda)$ et de surface $S(\Lambda)$, vérifie à température nulle et en champ magnétique nul le développement asymptotique :

$$\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}}(\Lambda) = \chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}}(\infty) + \frac{S(\Lambda)}{V(\Lambda)}\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{eff.\ bords}} + o\left(\frac{S(\Lambda)}{V(\Lambda)}\right) \quad \text{lorsque } V(\Lambda) \to \infty \tag{0.6}$$

où $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}}(\infty)$ est la limite thermodynamique de $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}}(\Lambda)$ et $\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{eff.\ bords}}$ la contributions liées aux effets de bords. De plus, $\chi_{\mathrm{m}}^{e^-\mathrm{s.s.,cond}}(\infty) = \chi_{\mathrm{Landau}}$ et $\chi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{eff.\ bords}} = \chi_{\mathrm{para}}^{\mathrm{eff.\ bords}}$.

Entre 1952 et 1975, la question relative à la prédominance de la susceptibilité de Landau-Peierls dans (0.5) a parallèlement engendrée de nombreux travaux. Les principaux sont [2], [66], [49], [50], [13], [108], [48], [89], [76], [75], etc... Un historique et une discussion des méthodes utilisées dans ces travaux sont proposées dans le paragraphe "Commentaires et connexions avec les résultats antérieurs".

Au vu des résultats présentés ci-dessus, il apparait naturellement trois principaux problèmes concernant la susceptibilité purement diamagnétique d'un gaz d'électrons de Bloch

[8] Ici écrite sous sa forme la plus simple, i.e. dans le cas d'un cristal isotrope. En général, c'est le tenseur de masse effective $m^*_{\alpha,\beta}$ qui se substitue à la masse effective.

à densitée fixée fortement dégénéré et en champ magnétique nul :

(**P1**) Un développement asymptotique du type (0.6) est-il encore valable ?
(**P2**) Sous quelles hypothèses χ_{LP} est la contribution prédominante dans (0.5) ?
(**P3**) Que peut-on dire de la susceptibilité purement diamagnétique d'un semi-conducteur ?

Cette thèse apporte des éléments de réponse pour chacune de ces questions.

Résultats principaux de la thèse

Les résultats principaux sont énoncés pour la plupart dans le cas général d'un gaz quantique quasi-parfait (obéissant soit à la statistique de Bose-Einstein, soit de Fermi-Dirac) avec les hypothèses maximales. La section suivante tâchera de faire la connexion entre ces résultats et la problématique soulevée dans la section précédente.

Considérons un gaz quantique constitué d'un grand nombre de particules sans spin et non relativiste, de masse $m > 0$ et de charge q, obéissant soit à la statistique de Fermi-Dirac (fermions) soit à la statistique de Bose-Einstein (bosons). On suppose que le gaz est confiné à l'intérieur d'une large "boîte" de taille macroscopique et qu'il est sujet à un champ magnétique extérieur uniforme. On fait l'hypothèse que, dans l'approximation à un corps, chaque particule interagit avec un potentiel d'origine électrique. Les intéractions entre particules sont négligées et le gaz est à l'équilibre thermique avec un réservoir de chaleur et de particules (de même nature).

Précisons les hypothèses. Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert simplement connexe contenant l'origine des coordonnées de $\mathbb{R}^3$. Le gaz est piégé dans la "boîte" $\Lambda_L := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x}/L \in \Lambda\}$. On considère un champ magnétique $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ avec $B \geq 0$, parallèle à la troisième composante de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. On lui associe le potentiel vecteur magnétique $A(\mathbf{x})$ qui s'écrit dans la jauge de Coulomb : $A(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x} = B\mathbf{a}(\mathbf{x})$, avec $\mathbf{a}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2}(-x_2, x_1, 0)$ (jauge symétrique). On néglige le spin des particules puisqu'on s'intéresse seulement aux effets purement diamagnétiques liés aux moments magnétiques induits par le mouvement "orbital" des particules en réaction au champ magnétique. On suppose que le potentiel V d'origine électrique est Kato-décomposable, $V \in \mathcal{K}_{\pm}(\mathbb{R}^3)$, i.e. $V = V^+ + V^-$ avec $V^+ := \sup\{V, 0\} \in \mathcal{K}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3)$ et $V^- := \sup\{-V, 0\} \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ (cf. Définition 1.1).

Quand la "boîte" est finie ($1 \leq L < \infty$), la dynamique de chaque particule est décrite par l'Hamiltonien défini sur $L^2(\Lambda_L)$ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$ par :

$$H_L(\omega, V) = \frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))^2 + V_L(\mathbf{x}), \quad (\hbar = 1 = m)$$

où V_L est la restriction de V à la "boîte" Λ_L et $\omega := qB/c \in \mathbb{R}$ est relié à la fréquence cyclotron ω_c de la particule par la relation $\omega = -\omega_c$. L'opérateur $H_L(\omega, V)$ est l'unique opérateur borné inférieurement et auto-adjoint de domaine $D(H_L(\omega, V)) \subset \mathcal{H}_0^1(\Lambda_L)$ associé à la forme sesquilinéaire correspondante. De plus $H_L(\omega, V)$ est à résolvante compacte ; par la suite, $\{e_j(\omega)\}_{j\geq 1}$ désignera l'ensemble de ses valeurs propores comptées avec leur

multiplicité et indexées dans un ordre croissant.

Introduisons les grandeurs caractéristiques de la réponse diamagnétique du gaz quantique quasi-parfait à volume fini. On utilise le formalisme grand canonique de la mécanique statistique quantique dans lequel le jeu de paramètres fixés est $(\beta, z, |\Lambda_L|)$. Ici $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ désigne "l'inverse" de la température T (k_B est la constante de Boltzmann), $z := \mathrm{e}^{\beta\mu}$ désigne la fugacité (μ est le potentiel chimique) et $|\Lambda_L|$ est le volume du confinement. Le domaine de définition pour la fugacité est $I_{+1} := (0, +\infty)$ pour le gaz de fermions et $I_{-1} = I_{-1}(\omega) := (0, \mathrm{e}^{\beta e_1(\omega)})$ pour le gaz de bosons.

Pour tout $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$, la pression et la densité grand canonique à volume fini du gaz quasi-parfait sont définies respectivement par :

$$P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda_L)} \big\{ \ln \big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega, V)} \big) \big\} = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|} \sum_{j=1}^{\infty} \ln \big(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)} \big) \tag{0.7}$$

$$\rho_L(\beta, \omega, z, \epsilon) := \beta z \frac{\partial P_L}{\partial z}(\beta, z, \omega, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}}{1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}} \tag{0.8}$$

où $\epsilon = -1$ fait référence au gaz de bosons, $\epsilon = +1$ fait référence au gaz de fermions.

Introduisons les domaines $\mathcal{D}_{-1}(e_1(\omega)) := \mathbb{C} \setminus [\mathrm{e}^{\beta e_1(\omega)}, +\infty)$ et $\mathcal{D}_{+1}(e_1(\omega)) := \mathbb{C} \setminus (-\infty, -\mathrm{e}^{\beta e_1(\omega)}]$. Le premier résultat est l'analycité jointe de la pression grand canonique à volume fini par rapport à la fugacité et à l'intensité du champ magnétique :

<u>Théorème</u> 0.1. *Soit $\beta > 0$. Alors pour chaque ensemble ouvert et borné $\mathcal{K}$ tel que $\overline{\mathcal{K}} \subset \mathcal{D}_\epsilon(e_1(0))$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_L$ de l'axe des réels tel que la pression grand canonique à volume fini $P_L(\beta, \omega, z, \epsilon)$ soit jointement analytique par rapport aux variables (ω, z) sur $\mathcal{N}_L \times \mathcal{K}$.*

Justifié par ce résultat, on peut définir les susceptibilités généralisées grand canonique à volume fini comme les dérivées partielles par rapport à l'intensité du champ magnétique B de la pression grand canonique à volume fini :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n P_L}{\partial \omega^n}(\beta, \omega, z, \epsilon) \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R},\ z \in \mathcal{D}_\epsilon(e_1(\omega))$$

Pour $z \in I_\epsilon$, les cas $n = 1$ et $n = 2$ correspondent respectivement à l'aimantation et à la susceptibilité magnétique grand canonique par unité de volume.

Si la densité de particules $\rho_0 > 0$ est prise comme paramètre extérieur, la pression et les susceptibilités généralisées grand canonique à densité fixée sont définis par :

$$\begin{aligned} P_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) &:= P_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon) \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R} \\ \forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) &:= \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon) \end{aligned}$$

où $\mu_L = \mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$, avec $\mu_L \in (-\infty, e_1(\omega))$ pour les bosons et $\mu_L \in \mathbb{R}$ pour les fermions, est l'unique solution de l'équation $\rho_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$.

A partir de maintenant, on suppose que la "boîte" Λ_L qui piège le gaz est le cube ouvert de longueur d'arête $L \geq 1$, i.e. $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$, et on s'intéresse aux limites thermodynamiques des grandeurs caractéristiques de la réponse diamagnétique à volume fini dans les deux cas suivants : le cas où V modélise un solide parfait et le cas où V modélise un solide imparfait (type alliage).

Cas où le potentiel V modélise un solide parfait

On suppose que $V \in L^p(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$ avec $p > 3$, i.e. V est une fonction à valeurs réélles et périodique par rapport à un réseau non dégénéré $\boldsymbol{\Upsilon}$ de $\mathbb{R}^3$ (assimilé à un réseau de Bravais), de cellule élémentaire Ω (cellule de Wigner-Seitz). Un tel potentiel modélise, dans l'approximation de Born-Oppenheimer, l'interaction de chaque particule avec le champ cristallin d'un solide parfait (i.e. réseau infini où chaque site est occupé par une même espèce d'ions supposés immobiles).

Quand $L = \infty$, on désignera par $H_\infty(\omega, V)$ l'unique extension auto-adjointe de l'opérateur $\frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))^2 + V(\mathbf{x})$ défini sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. $H_\infty(\omega, V)$ n'a que du spectre essentiel et est borné inférieurement ; par la suite on notera $E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega, V))$.

Lorsque la boîte $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ remplit l'espace tout entier (c'est-à-dire à la limite $L \to \infty$), on établit le second résultat :

Théorème 0.2. *Existence des limites thermodynamiques et identifications*
(i). Pour $(\beta, \omega, z) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R} \times \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, il existe $P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ et $\rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ tels que pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$:

$$\lim_{L\to\infty} \sup_{z\in K} |P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) - P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$
$$\lim_{L\to\infty} \sup_{z\in K} |\rho_L(\beta, \omega, z, \epsilon) - \rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

(ii). Pour $(\beta, \omega, z) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R} \times \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $n \in \mathbb{N}^*$, il existe $\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$ tel que pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ et $[\omega_1, \omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$:

$$\lim_{L\to\infty} \sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]} \sup_{z\in K} |\mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

(iii). Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, $P_\infty(\beta, \omega, \cdot, \epsilon)$ est analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$.
Pour tout $z \in \mathcal{D}_\epsilon$, $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ et on a les identifications :

$$\rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \beta z \frac{\partial P_\infty}{\partial z}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \lim_{L\to\infty} \beta z \frac{\partial P_L}{\partial z}(\beta, \omega, z, \epsilon) \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R},\ z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)) \tag{0.9}$$

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n P_\infty}{\partial \omega^n}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \lim_{L\to\infty} \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n P_L}{\partial \omega^n}(\beta, \omega, z, \epsilon) \tag{0.10}$$

(iv). Lorsque la densité de particules ρ_0 est un paramètre fixé, avec $\rho_0 \in (0, +\infty)$ pour les fermions et $\rho_0 \in (0, \rho_c)$ pour les bosons ($\rho_c \in \overline{\mathbb{R}_+^*}$ est la densité critique) :

$$\lim_{L\to\infty} P_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := P_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = P_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R}$$
$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon)$$

où $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$*, avec* $\mu_\infty \in (-\infty, E_0(\omega))$ *pour les bosons et* $\mu_\infty \in \mathbb{R}$ *pour les fermions, est l'unique solution de l'équation* $\rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$.

On se limite maintenant au gaz quasi-parfait de fermions de charge électrique $q = -e$. On suppose que l'intensité du champ magnétique est nulle et que la densité de particules $\rho_0 > 0$ est un paramètre fixé. La susceptibilité magnétique (par unité de volume) grand canonique à densité fixée $\rho_0 > 0$ et en champ magnétique nul est définie comme :

$$\mathcal{X}_\infty(\beta, \rho_0) = \mathcal{X}^2_\infty(\beta, \omega = 0, \rho_0, +1) := \mathcal{X}^2_\infty(\beta, \omega = 0, e^{\beta\mu_\infty(\beta,\rho_0)}, +1) \tag{0.11}$$

où $\mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ est l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, \omega = 0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, +1) = \rho_0$.
Dans le cas du gaz parfait, (0.11) n'est autre que la susceptibilité diamagnétique de Landau.

Supposons que $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$, i.e. V est lisse et périodique relativement au réseau cubique $\mathbb{Z}^3$. Dans le cas $\omega = 0$, la théorie de Bloch-Floquet pour les opérateurs périodiques permet de mettre en évidence la structure en bandes du spectre de l'opérateur $H_\infty(0, V)$. Si $\Omega^* = 2\pi\Omega$ désigne la (première) zone de Brillouin du réseau dual $(\mathbb{Z}^3)^* \equiv 2\pi\mathbb{Z}^3$, pour $j \in \mathbb{N}^*$, la j-ème fonction de bandes de Bloch est définie par $\mathcal{E}_j := [\min_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_j(\mathbf{k}), \max_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_j(\mathbf{k})]$ où $\{E_j(\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ est l'ensemble des valeurs propres (comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant) de l'Hamiltonien fibré $H(\mathbf{k}) := \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V$ agissant dans $L^2(\mathbb{T}^3)$ avec $\mathbb{T}^3 := \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ le tore à trois dimensions. Notons qu'avec cette définition, les fonctions d'énergie de Bloch $\mathbf{k} \mapsto E_j(\mathbf{k})$ sont continues mais pas nécessairement différentiables par rapport à $\mathbf{k}$ aux points de croisement. Le spectre de l'opérateur $H_\infty(0, V)$ est absolument continu et donné par $\sigma(H_\infty(0, V)) = \cup_{j=1}^\infty \mathcal{E}_j$. Notons que les ensembles $\mathcal{E}_j$ peuvent se chevaucher et certains peuvent même coïncider. Les énergies de bandes correspondent aux unions disjointes des $\mathcal{E}_j$. On parle de gap spectral si $\max \mathcal{E}_j < \min \mathcal{E}_{j+1}$ pour des $j \geq 1$. Le nombre de gaps dans le spectre est fini (si non nul).

Il reste à introduire la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(0, V)$. Rappelons sa définition. Pour $E \in \mathbb{R}$, soit $N_L(E)$ le nombre de valeurs propres de $H_L(0, V)$ plus petites que E. La densité d'états intégrée de $H_\infty(0, V)$ est définie par la limite :

$$n_\infty(E) := \lim_{L\to\infty} \frac{N_L(E)}{|\Lambda_L|} = \lim_{L\to\infty} \frac{\mathrm{Tr}\{\chi_{(-\infty,E]}(H_L(0, V))\}}{|\Lambda_L|}$$

Voici le théorème central de la thèse :

<u>Théorème</u> 0.3. (i). *Soit* $\rho_0 > 0$ *la densité de particules fixée. Soit* $\mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ *l'unique solution de l'équation* $\rho_\infty(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, +1) = \rho_0$. *Alors la limite* $\mathcal{E}_F(\rho_0) := \lim_{\beta\to+\infty} \mu_\infty(\beta, \rho_0)$ *existe et définie une fonction croissante, éventuellement discontinue, appelée l'énergie de Fermi. On distingue deux cas (semiconducteur et métallique) :*

SC *: S'il existe* $N \in \mathbb{N}^*$ *tel que* $\rho_0 = n_\infty(E)$ *pour tout* $E \in [\max \mathcal{E}_N, \min \mathcal{E}_{N+1}]$*, alors :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) = \frac{\max \mathcal{E}_N + \min \mathcal{E}_{N+1}}{2}$$

M *: supposons qu'il existe une unique solution* E_M *à l'équation* $n_\infty(E_M) = \rho_0$ *appartenant à l'intervalle* $(\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N)$ *avec* $N \in \mathbb{N}^*$ *éventuellement non unique. Alors :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) = E_M$$

(ii). Supposons que l'énergie de Fermi $\mathcal{E}_F(\rho_0)$ se situe au milieu d'un gap non trivial ($\max \mathcal{E}_N < \min \mathcal{E}_{N+1}$). Alors il existe $2N$ fonctions $\mathfrak{c}_j, \mathfrak{d}_j$ définies sur Ω^* en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles que l'intégrande ci-dessous puisse être prolongé par continuité sur tout Ω^*, et :

$$\mathcal{X}_{\mathrm{SC}}(\rho_0) := \lim_{\beta\to+\infty} \mathcal{X}(\beta,\rho_0) = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{j=1}^{N} \Big\{ \mathfrak{c}_j(\mathbf{k}) + \big\{E_j(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\}\mathfrak{d}_j(\mathbf{k}) \Big\}$$

(iii). Supposons qu'il existe un unique $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $\mathcal{E}_F(\rho_0) \in (\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N)$. Supposons que $\mathcal{S}_F := \big\{\mathbf{k} \in \Omega^* \,:\, E_N(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\}$ soit une surface lisse et non dégénérée. Alors il existe $2N+1$ fonctions $\mathcal{G}_N, \mathfrak{c}_j, \mathfrak{d}_j$ avec $1 \le j \le N$, définies sur Ω^* en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles qu'elles soient continues sur $\mathcal{S}_F$ et telles que le second intégrande ci-dessous puisse être prolongé par continuité sur tout Ω^* :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) := \lim_{\beta\to+\infty} \mathcal{X}(\beta,\rho_0) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot \qquad (0.12)\\
&\cdot\Bigg\{ \int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{\big|\nabla E_N(\mathbf{k})\big|} \left[\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\,\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_N(\mathbf{k})\right] +\\
&- 6\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{j=1}^{N} \Big[\chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_j(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_j(\mathbf{k}) + \big\{E_j(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\}\chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_j(\mathbf{k}))\mathfrak{d}_j(\mathbf{k})\Big]\Bigg\}
\end{aligned}$$

où $\chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(\cdot\,)$, $E_0 := E_0(0)$, est la fonction caractéristique de l'intervalle $[E_0, \mathcal{E}_F(\rho_0)]$.
(iv). Soit $k_F := (6\pi^2\rho_0)^{\frac{1}{3}}$. Alors lorsque $\rho_0 \to 0$, (0.12) donne la susceptibilité diamagnétique de Landau-Peierls :

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) = -\frac{e^2}{24\pi^2 c^2}\frac{(m_1^* m_2^* m_3^*)^{\frac{1}{3}}}{m_1^* m_2^*} k_F + o(k_F) \qquad (0.13)$$

avec $\left[\frac{1}{m_i^*}\right]_{1\le i\le 3}$ les valeurs propres de la hessienne $\{\partial^2_{k_i k_j} E_1(\mathbf{0})\}_{1\le i,j\le 3}$ définie positive.

Cas où le potentiel V modélise un solide imparfait (type alliage)

On choisit pour V un potentiel du type Anderson pour modéliser un réseau cristallin comportant des impuretés aléatoirement distribuées. Soit $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé complet. Un potentiel type Anderson V_η est un champ scalaire aléatoire (i.e. $V_\eta : N \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ est jointement mesurable par rapport au produit de la σ-algèbre $\mathfrak{A}$ des ensembles d'évènements dans N et de la σ-algèbre $\mathcal{B}(\mathbb{R}^3)$ des ensembles de Borel dans $\mathbb{R}^3$) dont les réalisations sont données par :

$$V_\eta(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{i}}(\eta) u(\mathbf{x} - \mathbf{i}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

avec $\{\lambda_{\mathbf{i}}\}_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3}$ une famille de variables aléatoires sur $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$. On suppose que les variables aléatoires $\lambda_{\mathbf{i}}(\eta)$ sont $\mathbb{P}$-indépendantes et identiquement distribuées avec valeurs sur un intervalle borné tel que $\mathbb{P}(\lambda_{\mathbf{0}}(\eta) \in [a,b]) = \int_a^b \mathrm{d}q\, f(q)$, $\|f\|_\infty < +\infty$. On suppose également que la fonction de site $u(\cdot\,)$ est bornée et $|u(\mathbf{x})| = \mathcal{O}(|\mathbf{x}|^{-3-\epsilon})$, $\epsilon > 0$, quand $|\mathbf{x}| \to +\infty$.

De manière imagée, chaque site du réseau cristallin (infini) est occupé par une même espèce d'ions sauf certains sites aléatoirement distibués qui sont occupés par d'autres espèces d'ions (portant une charge électrique différente).

Quand $L = \infty$, on désignera par $H_\infty(\omega, V_\eta)$ l'unique extension auto-adjointe de l'opérateur $\frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))^2 + V_\eta(\mathbf{x})$ défini sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. $\{H_\infty(\omega, V_\eta)\}_{\eta\in N}$ est une famille ergodique d'opérateurs auto-adjoint. $H_\infty(\omega, V_\eta)$ est borné inférieurement et son spectre purement discret est vide $\mathbb{P}$-presque sûrement. On notera $E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega, V_\eta))$.

Lorsque la boîte $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ remplit l'espace tout entier (c'est-à-dire à la limite $L \to \infty$), on établit le troisième résultat :

Théorème 0.4. *Existence des limites thermodynamiques*
(i) Pour $(\beta, \omega, z) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R} \times \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, il existe $P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ tel que :

$$\lim_{L\to\infty} |P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) - P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

(ii) Pour $(\beta, \omega, z) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R} \times \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $n \in \mathbb{N}^*$, il existe $\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$ tel que :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} |\mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

Remarque

Cette thèse apporte également quelques résultats mathématiques originaux. Citons par exemple l'analycité (par rapport à la variable ω) au sens de la topologie norme trace du semi-groupe à un paramètre de générateur $H_L(\omega, V)$ $(L < \infty)$ pour des potentiels singuliers du type Kato (cf. Corollaire 2.29). Ou encore l'analycité locale au sens de la topologie norme de Hilbert-Schmidt de la résolvante $(H_L(\omega, V) - \xi)^{-1}$, avec $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ et $L < \infty$ (cf. Proposition 2.10). Ces résultats ainsi que celui du théorème 0.1 ont été prolongés pour des potentiels vecteurs singuliers du type Kato dans [19].

Connexions et commentaires

Connexions avec la problématique

Une partie des résulats énoncés dans la section précédente concernent les gaz quantiques quasi-parfait en toute généralité. Recadrons ces résultats avec la problèmatique soulevée dans l'introduction.

Le cas particulier où le gaz décrit dans la section précédente est un gaz de fermions (obéissant à la statistique de Fermi-Dirac) portant une charge $q = -e$ où chaque fermion interagit avec un potentiel (d'origine électrique) périodique considéré dans la partie "Cas où le potentiel V modélise un solide parfait", constitue notre modèle pour un gaz d'électrons de Bloch dans un solide à l'équilibre thermique avec un réservoir de chaleur et de

(mêmes) particules. Ce gaz d'électrons est "piégé" à l'intérieur d'un solide macroscopique de forme cubique $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ délimité par ses bords $\partial\Lambda_L$. Ce solide est modélisé par un réseau périodique d'ions identiques supposés immobiles (approximation de Born-Oppenheimer). Chaque électron interagit avec un potentiel périodique modélisant le champ cristallin du solide. On néglige les interactions entre les électrons[9]. Enfin on néglige le spin des électrons puisqu'on s'intéresse seulement aux effets liés uniquement aux moments magnétiques générés par les électrons en mouvement dans le réseau cristallin en réaction au champ magnétique extérieur uniforme.

Dans le formalisme grand canonique de la mécanique statistique quantique, le jeu de paramètres extérieurs est $(\beta, z, |\Lambda_L|)$ où : $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ est "l'inverse" de la température, $z := \mathrm{e}^{\beta\mu}$ la fugacité (μ est le potentiel chimique) et $|\Lambda_L|$ le volume occupé par le système. Dans ce formalisme, la susceptibilité magnétique (par unité de volume) du gaz d'électrons de Bloch, à température $T > 0$, à la fugacité $z \in (0, +\infty)$ et sujet au champ magnétique d'intensité $B \geq 0$, est donnée par :

$$\mathcal{X}_L^2(\beta, \omega, z, +1) := \frac{\partial^2 P_L}{\partial B^2}(\beta, \omega, z, +1) = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_L}{\partial \omega^2}(\beta, \omega, z, +1), \quad \omega := \frac{-eB}{c} \leq 0$$

où $P_L(\beta, \omega, z, +1)$ est la pression grand canonique définie en (0.7). Le Théorème 0.1 assure que cette quantité est bien définie.
Supposons que la densité $\rho_0 > 0$ des électrons de Bloch soit prise comme paramètre extérieur. La susceptibilité magnétique (par unité de volume) à température $T > 0$ et à densité fixée $\rho_0 > 0$ s'écrit :

$$\mathcal{X}_L^2(\beta, \omega, \rho_0, +1) = \mathcal{X}_L^2(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, +1) \tag{0.14}$$

où $\mu_L = \mu_L(\beta, \omega, \rho_0, +1) \in \mathbb{R}$ est l'unique solution de l'équation $\rho_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, +1) = \rho_0$, avec $\rho_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, +1)$ la densité de particules grand canonique définie en (0.8).
La quantité définie en (0.14) incorpore la contribution purement diamagnétique liée au mouvement "orbital" des électrons de Bloch dans le réseau cristallin ainsi que la contribution (diamagnétique et/ou paramagnétique) liée aux effets de bords.

Dans ses travaux sur le gaz parfait d'électrons, L. Landau suppose implicitement que les effets de bords n'influencent pas le comportement thermodynamique global du système, et par conséquent, qu'il existe une grandeur thermodynamique intrinsèque au gaz d'électrons indépendante du confinement. Le théorème 0.2 permet de prouver l'existence de cette quantité thermodynamique, appelée limite thermodynamique, pour le gaz d'électrons de Bloch et d'identifier cette limite :

$$\lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^2(\beta, \omega, \rho_0, +1) = \mathcal{X}_\infty^2(\beta, \omega, \rho_0, +1)$$

avec :

$$\mathcal{X}_\infty^2(\beta, \omega, \rho_0, +1) := \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_\infty}{\partial \omega^2}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, +1)$$

où $P_\infty(\beta, \omega, z, +1) := \lim_{L\to\infty} P_L(\beta, \omega, z, +1)$ est la limite thermodynamqiue de la pression grand canonique et $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \omega, \rho_0, +1) \in \mathbb{R}$ est l'unique solution de l'équation

[9] Sauf si ces interactions peuvent être modélisées par un potentiel périodique de même période que le réseau cristallin et qui soit le même pour chaque électron.

$\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},+1)=\rho_0$, avec $\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},+1)$ définie en (0.9).
Dans la preuve du théorème 0.2, on prouvera en fait le développement asymptotique :

$$\mathcal{X}_L^2(\beta,\omega,\rho_0,+1)=\mathcal{X}_\infty^2(\beta,\omega,\rho_0,+1)+\mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right)\quad \text{lorsque } L\to\infty$$

Ce développement signifie tout simplement que lorsque le volume du confinement *supposé à géométrie "isotrope"* est suffisamment grand, les contributions liées aux effets de bords peuvent être traiter comme des corrections à la quantité $\mathcal{X}_\infty^2(\beta,\omega,\rho_0,+1)$.
Le problème (**P1**) soulevé à la fin de l'introduction est en parti résolu (nous n'avons pas étudié la nature des contributions liées aux effets de bords).

Le reste de l'étude est centrée sur la limite thermodynamique de la susceptibilité magnétique grand canonique lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle :

$$\mathcal{X}_\infty^2(\beta,\omega=0,\rho_0,+1)=\mathcal{X}_\infty^2(\beta,\omega=0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\infty(\beta,\rho_0)},+1)\quad \beta>0,\ \rho_0>0 \tag{0.15}$$

L'hypothèse de champ magnétique nul permet d'exclure les contributions "oscillantes" liées à l'effet de Haas-van Alphen[10]. Pour le gaz parfait d'électrons, (0.15) redonne la susceptibilité de Landau lorsque la température $T\to 0$ (gaz d'électrons fortement dégénéré) :

$$\mathcal{X}_\infty^2(\beta,\omega=0,\rho_0,+1)=-\frac{e^2(6\pi^2\rho_0)^{\frac{1}{3}}}{24\pi^2c^2}+\mathcal{O}(\beta^{-2})\quad \text{lorsque } \beta\to+\infty$$

La différence avec (0.3) vient du fait que nous n'avons pas pris en compte la dégénérescence liée au spin des électrons qui induit un facteur 2 supplémentaire au numérateur et la définition du vecteur d'onde de Fermi est modifié. Dans notre cas, $k_F=(6\pi^2\rho_0)^{\frac{1}{3}}$.

Dans le cas du gaz d'électrons de Bloch, c'est l'énergie de Fermi (plus haute énergie occupé par les électrons du système à la température nulle) qui permet de distinguer le cas semi-conducteur du cas métallique. Un semi-conducteur a son énergie de Fermi soit au milieu d'un gap non trivial (i.e. bande interdite séparant deux bandes de Bloch) soit à l'endroit où deux bandes de Bloch consécutives "se touchent" fermant ainsi le gap. Quant au métal, son énergie de Fermi se situe à l'intérieur d'une bande de Bloch.

Le théorème 0.3 donne une réponse complète aux problèmes (**P2**) et (**P3**) soulevés dans l'introduction. L'assertion (*ii*) (resp. (*iii*)) fournit un développement exact de la susceptibilité magnétique (par unité de volume) en champ magnétique nul et à température nulle d'un gaz d'électrons de Bloch dans un semi-conducteur (resp. dans un métal). Quant à l'assertion (*iv*), elle dit simplement que la susceptibilité de Landau-Peierls est la contribution principale à la susceptibilité magnétique (par unité de volume) d'un gaz d'électrons de Bloch dans un métal lorsque la densité des électrons $\rho_0\to 0$:

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0)\sim-\frac{e^2}{24\pi^2m^*c^2}k_F\quad \text{lorsque}\quad \text{lorsque } k_F\to 0$$

obtenue lorsque $m_1^*=m_2^*=m_3^*=m^*$.

[10]Une étude rigoureuse (semi-classique) de ce phénomène est proposée dans [28] pour un gaz parfait d'électrons.

Connexion avec les résultats antérieurs

En 1933, R. Peierls [87] introduit sa célèbre substitution (qui porte son nom) et construit un Hamiltonien effectif permettant de réduire le problème au cas des électrons libres. Cependant, l'approximation à une seule bande d'énergie constitue une simplification trop importante du problème.

En 1952, E. Adams [2] est le premier à suggérer que la formule de Landau-Peierls n'est pas la contribution la plus importante (à la susceptibilité magnétique des électrons de Bloch) et qu'il faut tenir compte des transitions interbandes virtuelles.

En 1957, T. Kjeldaas et W. Kohn [66] sont les premiers à suggérer que la formule de Landau-Peierls doit être corrigée avec des termes d'ordre supérieur dans la densité de particules et que ces termes proviennent des bandes ne contenant pas l'énergie de Fermi.

En 1960, J. Hebborn et E. Sondheimer [49], [50] traitent le problème complet d'un point de vue de la mécanique quantique ; même si les porteurs de charge sont des boltzons (obéissant à la statistique de Maxwell-Boltzmann) et non des fermions. Contrairement aux précédents auteurs, ils développent une théorie des perturbations magnétiques pour la trace par unité de volume définissant la pression. Le principal problème est qu'ils supposent que toutes les fonctions d'énergie de Bloch ne se chevauchent pas (ce qui est générallement faux), et que les fonctions de Bloch sont lisses dans les variables de quasi-moment.

En 1962, L. Roth [89] développe un calcul type pseudodifférentiel partant des idées de R. Peierls, T. Kjeldass et W. Kohn. Ce formalisme lui sert à calculer des traces locales et des développements magnétiques. Des résultats similaires sont obtenus par E.I. Blount [13]. Leur calculs formels peuvent très vraisemblablement être fait rigoureusement dans le cas de bandes de Bloch simples (i.e. non dégénérées).

En 1964, Hebborn *et al* [48] simplifient le formalisme développé dans [50] et donnent une formule pour la susceptibilité magnétique en champ magnétique nul pour un gaz de boltzons. Leur méthode peut être rendue vraisemblablement rigoureuse pour des systèmes où les fonctions d'énergie de Bloch ne se croisent pas.

La même année, G. Wannier et U. Upadhyaya [108] reprènent la méthode préconisée par Peierls et remplacent le vrai opérateur de Schrödinger magnétique par un nombre de bandes (éventuellement infini) avec le facteur de phase de Peierls. Ils affirment que leur résultat est équivalent à celui de J. Hebborn et E. Sondheimer [50], mais aucun détail n'est donné. Ces résultats utilisent de manière essentielle le non-croisement des bandes.

En 1969, P. Misra et L. Roth [76] combinent la méthode de [89] avec les idées de [108] afin d'inclure les électrons de coeur dans les calculs.

En 1972, P. Misra et L. Kleinman [75] utilisent des formules issues de la théorie des perturbations (les célèbres "sum rules") pour remplacer les dérivées par rapport aux variables de quasi-moment avec des éléments de matrice du "vrai" opérateur moment. Ils réusissent de cette manière à réécrire les formules précédemment établies par P. Misra et L. Roth (n'ayant de sens que pour des bandes sans croisement) dans une forme tenant compte des croisements de bandes.

En 1990, B. Hellfer et J. Sjöstrand [52] développent pour la première fois une théorie rigoureuse basée sur la substitution de Peierls et considèrent la connexion avec l'effet de Haas-Van Alphen. Ces résultats et bien d'autres ont été revus par G. Nenciu en 1991 [78].

Chapitre 1

Systèmes magnétiques

1 Eléments de physique

Plaçons-nous dans $\mathbb{R}^3$ (on se limitera à un problème à trois dimensions). Pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, $|\mathbf{x}| := \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}$ désignera sa norme euclidienne induite par le produit scalaire canonique défini par $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{3} u_i v_i$, avec $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ et $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$.

Construisons l'Hamiltonien classique d'une particule libre non relativiste de masse $m > 0$ portant une charge $q \neq 0$ plongée dans un champ électromagnétique stationnaire ($\mathbf{E}(\mathbf{x})$, $\mathbf{B}(\mathbf{x})$) dans l'espace tout entier. On se place sous l'hypothèse où les champs sont suffisamment réguliers. Soient $U(\mathbf{x})$ le potentiel électrique et $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ le potentiel vecteur magnétique définis respectivement (à une constante près) par :

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla U(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}) = \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad \text{avec} \quad \nabla := (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \partial_{x_3})$$

Dans le référentiel d'étude $\mathcal{R}$ supposé galiléen, la particule est soumise à la force de Lorentz :

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = q\big(- \nabla U(\mathbf{x}) + \dot{\mathbf{x}} \wedge \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{x})\big) \quad \text{(unités SI)} \tag{1.1}$$

où $\dot{\mathbf{x}} := d\mathbf{x}/dt$ désigne la vitesse de la particule dans le référentiel $\mathcal{R}$. Notons qu'en unités CGS $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ est remplacé par $\mathbf{A}(\mathbf{x})/c$ dans (1.1), où c désigne la célérité de la lumière. Bien que la force de Lorentz ne soit pas conservative au sens usuel (en raison de la présence du $\dot{\mathbf{x}}$ dans (1.1)), introduisons le potentiel généralisé :

$$\Phi(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) := q\big(U(\mathbf{x}) - \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})\big) \tag{1.2}$$

Soit $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ la base canonique de $\mathbb{R}^3$. Soient $\{x_i\}_i$ et $\{\dot{x}_i\}_i$, avec $i \in \{1, 2, 3\}$, les coordonnées généralisées indépendantes représentant chacune un degré de liberté pour la particule. Etant donné (1.2) et en vertu de (1.1), on peut vérifier que :

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial \Phi}{\partial \dot{x}_i}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) - \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}), \quad i \in \{1, 2, 3\}$$

En désignant par $T := \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2$ l'énergie cinétique de la particule, le Lagrangien associé au système dans le référentiel galiléen $\mathcal{R}$ sécrit (voir par ex. [71]) :

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) := T - \Phi(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + q \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) - qU(\mathbf{x})$$

Les équations d'Euler-Lagrange permettant de déterminer la trajectoire effective de la particule sont données par :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}}) = 0, \quad i \in \{1,2,3\}$$

Dans la cas où $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}$ est uniforme et $U = 0$, le mouvement de la particule est hélicoïdal, i.e. la composition d'un mouvement circulaire uniforme dans le plan normal à $\mathbf{B}$ et d'un mouvement rectiligne uniforme suivant $\mathbf{B}$. (Il est à noter que dans le cas général où les champs sont stationnaires et orthogonaux, la trajectoire de la particule est trochoïdale).

Le Lagrangien étant indépendant du temps, on déduit l'Hamiltonien classique par :

$$H(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \mathbf{p}\cdot\dot{\mathbf{x}} - \mathcal{L}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}}), \quad p_i := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}})$$

avec p_i l'impulsion généralisée ou moment conjugué de x_i. Il vient alors :

$$\begin{aligned} H(\mathbf{x},\mathbf{p}) &= \big(m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}(\mathbf{x})\big)\cdot\dot{\mathbf{x}} - \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - q\dot{\mathbf{x}}\cdot A(\mathbf{x}) + qU(\mathbf{x}) = T + qU(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{2m}\big(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x})\big)^2 + qU(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{1.3}$$

En supposant que la particule (non relativiste) soit sans spin, le traitement quantique fait apparaître de nouveaux effets ("purement quantiques") tels que l'existence, lorsque $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}$ est uniforme et $U = 0$, de niveaux d'énergies équidistants (les niveaux de Landau) dans un plan normal à $\mathbf{B}$. L'Hamiltonien quantique décrivant la dynamique de la particule se déduit directement de (1.3) par les règles de quantification de Dirac. En vertu du principe de correspondance, à chaque fonction de l'énergie classique correspond *formellement* un opérateur hermitien sur l'espace de Hilbert des états quantiques. Ainsi en désignant par $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ les observables associées à la position $\mathbf{x}$ et à l'impulsion généralisée $\mathbf{p}$, l'opérateur quantique H correspondant à $H(\mathbf{x},\mathbf{p})$ s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m}\big(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}})\big)^2 + V(\hat{\mathbf{x}}) \tag{1.4}$$

où $V(\hat{\mathbf{x}}) := qU(\hat{\mathbf{x}})$ et où l'opérateur $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ obéit aux règles de commutation canonique :

$$[\hat{x}_i,\hat{x}_j] = 0, \qquad [\hat{p}_i,\hat{p}_j] = 0, \qquad [\hat{x}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{avec} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{quand } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

L'Hamiltonien défini formellement en (1.4) constitue le point de départ de notre analyse.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante. Dans un premier temps, on construit rigoureusement, comme opérateur auto-adjoint sur l'espace de Hilbert des états quantiques, l'Hamiltonien d'une particule quantique chargée, supposée sans spin et non relativiste, plongée dans un champ magnétique extérieur $\mathbf{B}$ uniforme et intéragissant avec un potentiel V d'origine électrique. On traitera le cas où la particule est piégée à l'intérieur d'une "boîte" (généralement modélisé par un puits de potentiel infini) et le cas sans confinement (comme au-dessus). Les hypothèses précises de notre modèle figurent au paragraphe 3.1. Puis, on construit l'Hamiltonien d'un gaz quantique confiné constitué d'un très grand nombre de telles particules sans interaction entre elles, lorsque leur nombre est fixe puis indéterminé (cas où le gaz est en contact avec un réservoir de mêmes particules, par exemple).

En vu de préparer le chapitre 2, on introduit ensuite toute une série de résultats techniques en relation avec les semi-groupes et les puissances de la résolvante (définitions, estimations sur les normes L^p, normes de Hilbert-Schmidt et normes trace à volume fini,...).

Enfin dans une dernière partie, on introduit les principaux objets, en relation avec le gaz quantique quasi-parfait confiné, nécessaires à l'étude statistique du phénomène de diamagnétisme. En particulier, on formule les grandeurs caractéristiques de la réponse (dia)magnétique à volume fini dans l'ensemble grand-canonique (pression, densité, susceptibilités) ainsi que dans l'ensemble canonique (énergie libre, susceptibilités) de la mécanique statistique quantique. L'étude des propriétés de ces grandeurs sera l'objet du chapitre 2.

2 Notations et définitions

Dans cette section, on définit les espaces de fonctions auxquels nous ferons référence par la suite puis on introduit la classe de fonctions de Kato (voir par ex. [34]). Cette classe joue un rôle important puisqu'elle regroupe l'essentiel des potentiels scalaires singuliers utilisés en physique menant à un opérateur de Schrödinger borné inférieurement, ou en d'autres termes, avec énergie de l'état fondamental finie.

Pour $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un sous-ensemble non-vide, χ_Ω désigne sa fonction indicatrice :

$$\mathbf{x} \mapsto \chi_\Omega(\mathbf{x}) := \begin{cases} 1 & \text{pour } \mathbf{x} \in \Omega \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$\partial\Omega := \overline{\Omega} \setminus \mathring{\Omega}$ désigne les bords de Ω, avec $\overline{\Omega}$ l'adhérence de Ω et $\mathring{\Omega}$ l'intérieur de Ω.

Soit $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ un ouvert de mesure (de Lebesgue) non nulle. L'espace de Banach $L^p(\Omega)$, avec $1 \leq p \leq \infty$, des fonctions de puissance p-ième intégrables (au sens de Lebesgue) est constitué des fonctions mesurables à valeurs complexes $f : \Omega \to \mathbb{C}$ telles que :

$$\|f\|_p := \left(\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\, |f(\mathbf{x})|^p \right)^{\frac{1}{p}} < +\infty \quad \text{lorsque } 1 \leq p < \infty$$
$$\|f\|_\infty := \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Omega} |f(\mathbf{x})| < +\infty \quad \text{lorsque } p = \infty$$

L'espace $L^2(\Omega)$ devient un espace de Hilbert lorsqu'il est muni du produit scalaire :

$$\langle f, g \rangle := \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\, \overline{f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$

La norme d'un opérateur $A : L^p(\Omega) \to L^q(\Omega)$, avec $1 \leq p, q \leq \infty$, est définie par :

$$\|A\|_{p,q} := \sup_{\|\psi\|_p = 1} \|A\psi\|_q$$

L'espace $L^p_{\mathrm{loc}}(\Omega)$, avec $1 \leq p \leq \infty$, des fonctions de puissance p-ième localement intégrables est constitué des fonctions $f : \Omega \to \mathbb{C}$ telles que $f\chi_K \in L^p(\Omega)$ pour tout compact $K \subseteq \Omega$. L'espace $L^p_{\mathrm{uloc}}(\Omega)$, avec $1 \leq p \leq \infty$, des fonctions de puissance p-ième localement uniformément intégrables est constitué des fonctions $f : \Omega \to \mathbb{C}$ telles que $f \in L^p_{\mathrm{loc}}(\Omega)$ et :

$$\|f\|_{p,\mathrm{uloc}} := \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \left(\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{y}\, \chi_{\mathcal{B}(\mathbf{x},1)}(\mathbf{y}) |f(\mathbf{y})|^p \right)^{\frac{1}{p}} < +\infty \quad \text{lorsque } 1 \leq p < \infty$$
$$\|f\|_{\infty,\mathrm{uloc}} := \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Omega} |f(\mathbf{x})| < +\infty \quad \text{lorsque } p = \infty$$

où $\mathcal{B}(\mathbf{x},1)$ désigne la boule ouverte de centre $\mathbf{x}$ et de rayon 1.
A noter que dans le cas $\Omega = \mathbb{R}^3$, on a les inclusions suivantes :

$$L^p(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3) \subset L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \quad p \geq 1$$
$$L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^q_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3), \quad L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^q_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \quad p \geq q \geq 1$$

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un ensemble ouvert. L'espace de Sobolev local $\mathcal{H}^m(\Omega)$, avec $m \in \mathbb{N}$, est l'ensemble des fonctions $f : \Omega \to \mathbb{C}$ telles que $f \in L^2(\Omega)$ et dont les dérivées au sens faible $D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \partial x_3^{\alpha_3}} \in L^2(\Omega)$, avec $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ tel que $0 \leq |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \leq m$.
$\mathcal{H}^m(\Omega)$ est un espace de Hilbert lorsqu'il est muni de la norme :

$$\|f\|_{+m} = \left(\sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \|D^\alpha f\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

L'espace de Sobolev local $\mathcal{H}_0^m(\Omega)$ est défini comme la complétion de $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$, l'espace des fonctions indéfiniment dérivables à support compact dans Ω, dans la norme $\| \cdot \|_{+m}$.
Notons qu'on a les inclusions : $\mathcal{H}_0^m(\Omega) \subset \mathcal{H}^m(\Omega)$, avec $m \in \mathbb{N}$; $\mathcal{H}_0^m(\Omega) \subset \mathcal{H}_0^n(\Omega)$ et $\mathcal{H}^m(\Omega) \subset \mathcal{H}^n(\Omega)$ pour tout entier $m \geq n \geq 0$.

Convention d'extension :

Soit $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ un ouvert non-vide. Toute fonction f à valeurs complexes définie a priori sur Ω peut être étendue à $\mathbb{R}^3$ en posant $f(\mathbf{x}) := 0$ pour $\mathbf{x} \notin \Omega$. On utilise cette convention pour plonger injectivement $L^p(\Omega)$ dans $L^p(\mathbb{R}^3)$, $p \geq 1$. Ainsi, $L^p(\Omega) \subseteq L^p(\mathbb{R}^3)$.
On a également $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega) \subseteq \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ avec la convention d'extension définie ci-dessus.

On introduit maintenant la classe de fonctions de Kato (voir [34]) :

Définition 1.1. *Un potentiel scalaire $V : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ est dans la classe de Kato $\mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ si*

$$\lim_{r \downarrow 0} \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|<r} \mathrm{d}\mathbf{y} \, \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = 0$$

$V \in \mathcal{K}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$, la classe de Kato locale, si $V\chi_K \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ pour tout compact $K \subset \mathbb{R}^3$.
V est dit "Kato décomposable", que l'on note $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3)$, si :

$$V^+ := \sup\{V, 0\} \in \mathcal{K}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \quad \textit{et} \quad V^- := \sup\{-V, 0\} \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3) \tag{1.5}$$

Remarque 1.2. Ci-dessous quelques remarques provenant de [21], [34] et [101] :
(i). Un moyen pratique de savoir si une fonction appartient à la classe de Kato ou à la classe de Kato locale est d'utiliser les inclusions suivantes. Pour tout $p > \frac{3}{2}$,

$$L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3) \subset \mathcal{K}(\mathbb{R}^3) \subset L^1_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$$
$$L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \subset \mathcal{K}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$$

(ii). $\mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ est un espace de Banach lorsqu'il est muni de la norme :

$$\|V\|_{\mathcal{K}(\mathbb{R}^3)} := \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|<1} \mathrm{d}\mathbf{y} \, \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$$

3 Systèmes magnétiques et Hamiltoniens

Cette section tient une place centrale dans notre étude. En effet, on introduit le modèle et les hypothèses qui seront utilisés dans ce manuscrit pour l'étude statistique des effets diamagnétiques liés aux moments magnétiques orbitaux des particules d'un gaz quantique quasi-parfait (cf. Définition 1.3) confiné. Basé sur la construction rigoureuse de l'Hamiltonien d'une seule particule sous les hypothèses du modèle, on construit successivement l'Hamiltonien d'un gaz quantique quasi-parfait confiné constitué d'un très grand nombre, fixé puis indéterminé, de particules identiques et indiscernables. Ceci constitue une étape incontournable pour définir les grandeurs caractéristiques du gaz dans l'ensemble grand-canonique de la mécanique statistique quantique, cf. section 5.

3.1 Modèle & hypothèses

Considérons un gaz quantique constitué d'un très grand nombre de particules non-relativistes identiques et indiscernables, de charge $q \neq 0$ et de masse $m > 0$. Le spin des particules n'est pas considéré dans notre modèle puisque seuls les effets liés aux moments magnétiques orbitaux des particules seront étudiés[1]. On suppose que le gaz est piégé à l'intérieur d'une large "boîte" Λ et sujet à un champ magnétique extérieur $\mathbf{B}$ uniforme.
On suppose enfin que le gaz est quasi-parfait dans le sens :

Définition 1.3. *Un gaz de particules identiques est dit quasi-parfait ou presque-parfait si :*
(i). Les intéractions entre particules sont négligées (hypothèse d'un gaz dilué),
(ii). Chaque particule du gaz interagit avec un potentiel d'origine électrique modélisant le milieu extérieur, par exemple un réseau critallin parfait ou désordonné (type alliage), etc...

Précisons les hypothèses qui seront utilisées par la suite dans les chapitres 1 et 2 :

Hypothèse (H1).
Le domaine de confinement du gaz $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ est un ouvert borné simplement connexe.

Hypothèse (H2).
Le champ magnétique extérieur $\mathbf{B} := B\mathbf{e}_3$, avec $B > 0$, est orienté suivant la troisième composante de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. On lui associe le potentiel vecteur magnétique :

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x} = B\mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad \textit{avec} \quad \mathbf{a}(\mathbf{x}) := \frac{\mathbf{e}_3}{2} \wedge \mathbf{x} = \frac{1}{2}(-x_2, x_1, 0) \tag{1.6}$$

$\mathbf{a}(\cdot)$ *ainsi défini porte usuellement le nom de "jauge symétrique".*
Avec ce choix de potentiel vecteur, on a $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) = 0$ (jauge de Coulomb) et $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{x})$.

Hypothèse (H3).
Le potentiel électrique V est "Kato décomposable", i.e. $V = V^+ - V^-$ avec $V^\pm$ définis en (1.5). On désignera par la suite la restriction de V à Λ par le même symbole.

A noter que l'hypothèse (**H2**) restera inchangée tout au long du manuscrit. Par contre, les hypothèses (**H1**) et (**H3**) se verront affaiblies (dans les chapitres 4 et 5 ; en raison des méthodes mises en œuvre au cours de l'étude, cf. chapitre 3) respectivement en :
(**H1'**) Le domaine de confinement $\Lambda = \Lambda_L := (-L/2, L/2)^3$ est le cube ouvert centré en l'origine des coordonnées de longueur d'arête $L \geq 1$.
(**H3'**) Avec la convention d'extension de la section 2, $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0 > 0$.

[1] Lorsque le couplage spin-orbite est négligé, les effets liés aux moments magnétiques de spin des particules et ceux liés au moment magnétique orbitaux des particules sont *additifs* ; voir par ex. [76].

3.2 Hamiltonien à une particule

On construit ici l'Hamiltonien d'une seule particule avec, puis, sans confinement. Partant de l'expression formelle (1.4), en utilisant les unités CGS ($\mathbf{A} \to \mathbf{A}/c$) et les unités atomiques $\hbar = 1 = m$; l'objectif de ce paragraphe est de construire rigoureusement l'opérateur de Schrödinger avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda$ défini par

$$H_\Lambda(\omega, V) := \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2 + V, \quad \text{avec } \omega := \frac{qB}{c} \in \mathbb{R} \quad \text{(unités CGS)} \tag{1.7}$$

comme un opérateur auto-adjoint agissant sur l'espace de Hilbert $L^2(\Lambda)$.
A noter que le paramètre ω est lié à la fréquence cyclotron ω_c de la particule par $\omega_c = -\omega$.

Sous les hypothèses (**H1**), (**H2**) et (**H3**) du paragraphe 3.1, on établit :

Proposition 1.4. *Pour $\omega \in \mathbb{R}$, soit $h_\Lambda^{\omega,V} : \mathcal{H}_0^1(\Lambda) \times \mathcal{H}_0^1(\Lambda) \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire :*

$$h_\Lambda^{\omega,V}(\phi, \psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle(-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\phi, (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\psi\rangle + \\ + \langle(V^+)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^+)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle - \langle(V^-)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^-)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle \tag{1.8}$$

Alors $H_\Lambda(\omega, V)$ est l'unique opérateur auto-adjoint borné inférieurement dans $L^2(\Lambda)$, de domaine $D(H_\Lambda(\omega, V)) \subset \mathcal{H}_0^1(\Lambda)$, associé à la forme sesquilinéaire $h_\Lambda^{\omega,V}$ tel que :

$$\forall\, \phi \in \mathcal{H}_0^1(\Lambda),\ \forall\, \psi \in D(H_\Lambda(\omega, V)), \quad h_\Lambda^{\omega,V}(\phi, \psi) = \langle\phi, H_\Lambda(\omega, V)\psi\rangle$$

Preuve Proposition 1.4.
Par souci de clarté, lorsqu'on définira une forme sesquilinéaire, on désignera par le même symbole sa fermeture ou/et toute extension fermée de cette forme. La construction s'effectue en 3 étapes : d'abord $\omega = 0$ et $V = 0$, puis $\omega \in \mathbb{R}$ et $V = 0$, enfin $\omega \in \mathbb{R}$ et $V \neq 0$.

Etape 1 : considérons $\omega = 0$ et $V = 0$. Soit $h_\Lambda^{0,0} : \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda) \times \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda) \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire densément définie dans $L^2(\Lambda)$, symétrique et positive, définie par :

$$h_\Lambda^{0,0}(\phi, \psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle -i\partial_{x_j}\phi, -i\partial_{x_j}\psi\rangle$$

Le domaine de la fermeture de $h_\Lambda^{0,0}$ est l'espace de Sobolev local $\mathcal{H}_0^1(\Lambda)$ (voir par ex. [35]) défini comme la complétion de $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$ pour la norme $\|\cdot\|_{+1}$ (voir section 2). Puisque la forme $h_\Lambda^{0,0}$ étendue au domaine $\mathcal{H}_0^1(\Lambda)$ est fermée, symétrique et non-négative, d'après le théorème VIII.15 dans [90], elle définit un unique opérateur auto-adjoint non-négatif sur $L^2(\Lambda)$, noté $H_\Lambda(0,0)$, de domaine $D(H_\Lambda(0,0)) \subset \mathcal{H}_0^1(\Lambda)$, tel que :

$$\forall\, \phi \in \mathcal{H}_0^1(\Lambda),\ \forall\, \psi \in D(H_\Lambda(0,0)), \quad h_\Lambda^{0,0}(\phi, \psi) = \frac{1}{2}\langle\phi, (-i\nabla)^2\psi\rangle$$

Formellement, $-2H_\Lambda(0,0) = \nabla^2$ correspond au Laplacien usuel sur Λ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda$.

Etape 2 : considérons $\omega \neq 0$ et $V = 0$. En désignant par $\mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0)) = \mathcal{H}_0^1(\Lambda)$ le domaine de la forme associée à l'opérateur $H_\Lambda(0,0)$, soit $h_\Lambda^{\omega,0} : \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0)) \times \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0)) \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire symétrique et non-négative définie par :

$$h_\Lambda^{\omega,0}(\phi,\psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle(-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\phi, (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\psi\rangle = h_\Lambda^{0,0}(\phi,\psi) + s_\Lambda^\omega(\phi,\psi)$$

où $s_\Lambda^\omega : \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0)) \times \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0)) \to \mathbb{C}$ est la forme sesquilinéaire symétrique définie par :

$$s_\Lambda^\omega(\phi,\psi) := -\omega\sum_{j=1}^{3}\langle -i\partial_{x_j}\phi, a_j\psi\rangle + \frac{\omega^2}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle a_j\phi, a_j\psi\rangle \tag{1.9}$$

Soit $\varphi \in D(H_\Lambda(0,0))$. Compte-tenu de la définition de la "jauge symétrique" (1.6) :

$$a_\infty := \sup_{\mathbf{x}\in\Lambda}|\mathbf{a}(\mathbf{x})| < +\infty \tag{1.10}$$

par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient :

$$\forall\,\epsilon > 0, \quad |s_\Lambda^\omega(\varphi,\varphi)| \leq \epsilon\langle\varphi, H_\Lambda(0,0)\varphi\rangle + \frac{\omega^2}{2}a_\infty^2(1+\epsilon^{-1})\|\varphi\|_2$$

Il s'ensuit que s_Λ^ω est $H_\Lambda(0,0)$-borné au sens des formes avec borne relative nulle. D'après le théorème KLMN (voir théorème X.17 dans [91]), la forme $h_\Lambda^{\omega,0}$ définie sur $\mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0))$ est fermée et il existe un unique opérateur auto-adjoint non-négatif, noté $H_\Lambda(\omega,0)$, associé à la forme $h_\Lambda^{0,0} + s_\Lambda^\omega$ de domaine $\mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0)) = \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0))$ tel que :

$$\forall\,\phi \in \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0)),\ \forall\,\psi \in D(H_\Lambda(0,0)), \quad \langle\phi, H_\Lambda(\omega,0)\psi\rangle = \langle\phi, H_\Lambda(0,0)\psi\rangle + s_\Lambda^\omega(\phi,\psi) \tag{1.11}$$

On adoptera la représentation $H_\Lambda(\omega,0) := \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2$. Cette construction de $H_\Lambda(\omega,0)$ correspond formellement à imposer les conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda$.

Etape 3 : considérons $\omega \in \mathbb{R}$ et $V \neq 0$.
En vertu de la convention d'extension (cf. section 2), soit $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3)$. Soit $h_\Lambda^{\omega,V}$ la forme sesquilinéaire symétrique définie en (1.8) de domaine $\mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0))$. D'une part $V^- \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ est $H_\Lambda(\omega,0)$-borné au sens des formes avec borne relative nulle (voir [86]). D'autre part puisque Λ est borné, $V^+ \in \mathcal{K}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3)$ est également $H_\Lambda(\omega,0)$-borné au sens des formes avec borne relative nulle. Par conséquent, pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\epsilon' \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\forall\,\varphi \in \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0)), \quad |\langle(V^\pm)^{\frac{1}{2}}\varphi, (V^\pm)^{\frac{1}{2}}\varphi\rangle| \leq \epsilon\frac{1}{2}\langle(-i\nabla - \omega\mathbf{a})\varphi, (-i\nabla - \omega\mathbf{a})\varphi\rangle + \epsilon'\|\varphi\|_2^2$$

Encore par le théorème KLMN [91], la forme $h_\Lambda^{\omega,V}$ définie sur $\mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0))$ est fermée et bornée inférieurement, et il existe un unique opérateur auto-adjoint borné inférieurement, noté $H_\Lambda(\omega,V)$, associé à la forme $h_\Lambda^{\omega,V}$ de domaine $\mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,V)) = \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,0))$ tel que :

$$\forall\,\phi \in \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega,V)),\ \forall\,\psi \in D(H_\Lambda(\omega,0)), \quad \langle\phi, H_\Lambda(\omega,V)\psi\rangle = \langle\phi, H_\Lambda(\omega,0)\psi\rangle + \langle\phi, V\psi\rangle \tag{1.12}$$

■

Remarque 1.5. $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$ est un cœur de la forme sesquilinéaire $h_\Lambda^{\omega,V}$ définie en (1.8).

Remarque 1.6. D'après [93] proposition XIII.15.1, $H_\Lambda(0,0)$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_\Lambda(0,0)) := \{\phi \,:\, \phi \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Lambda}),\ \phi|_{\partial\Lambda} = 0\}$.

Remarque 1.7. $H_\Lambda(\omega,0)$, avec $\omega \in \mathbb{R}$, peut également être construit de la façon suivante. Soient $s_{1,\Lambda} := \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla)$ et $s_{2,\Lambda} := \mathbf{a}^2(\mathbf{x})/2$ les opérateurs symétriques définis sur $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$. $s_{j,\Lambda}$ étant $H_\Lambda(0,0)$-borné au sens des opérateurs avec borne relative nulle (cf. preuve Lemme 1.19), le théorème de Kato-Rellich (théorème X.12 dans [91]) assure que $H_\Lambda(\omega,0) = H_\Lambda(0,0) + \omega s_{1,\Lambda} + \omega^2 s_{2,\Lambda}$ est non-négatif et essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_\Lambda(0,0))$.

Proposition 1.8. *Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, $H_\Lambda(\omega,V)$ est un opérateur à résolvante compacte.*

Preuve Proposition 1.8.
Sous l'hypothèse (**H1**) concernant le domaine de confinement Λ, l'opérateur $H_\Lambda(0,0) = -\frac{1}{2}\Delta$ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda$ est un opérateur à résolvante compacte (voir [35]). Puisque la forme symétrique s_Λ^ω définie en (1.9) est $H_\Lambda(0,0)$-bornée au sens des formes avec borne relative nulle, d'après le théorème XIII.68 dans [93], l'opérateur $H_\Lambda(\omega,0) = H_\Lambda(0,0) + s_\Lambda^\omega$ (dans le sens (1.11)) est à résolvante compacte.
Il en est de même pour l'opérateur $H_\Lambda(\omega,V) = H_\Lambda(\omega,0) + V$ (dans le sens (1.12)).

■

Ainsi, $H_\Lambda(\omega,V)$ a un spectre purement discret avec un point d'accumulation en $+\infty$. On notera par la suite $\{e_j(\omega)\}_{j\geq 1}$, avec $e_j(\omega) = e_j(\omega,V,\Lambda)$, l'ensemble des valeurs propres de $H_\Lambda(\omega,V)$ comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant.

En l'absence de confinement...
On donne quelques résultats permettant de construire l'opérateur défini par :

$$H_\infty(\omega,V) = H_{\mathbb{R}^3}(\omega,V) := \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2 + V, \quad \text{avec } \omega := \frac{qB}{c} \in \mathbb{R} \quad \text{(unités CGS)} \tag{1.13}$$

comme un opérateur auto-adjoint agissant sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Sous les hypothèses (**H2**) et (**H3**) du paragraphe 3.1, on établit :

Proposition 1.9. *Soit $\mathcal{Q}$ le domaine défini par :*

$$\mathcal{Q} := \left\{\phi \in L^2(\mathbb{R}^3) \ :\ (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\phi \in L^2(\mathbb{R}^3),\ (V^+)^{\frac{1}{2}}\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)\right\} \tag{1.14}$$

Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, soit $h_\infty^{\omega,V} : \mathcal{Q} \times \mathcal{Q} \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire définie par :

$$h_\infty^{\omega,V}(\phi,\psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle(-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\phi, (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\psi\rangle + \\ + \langle(V^+)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^+)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle - \langle(V^-)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^-)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle \tag{1.15}$$

Alors $H_\infty(\omega,V)$ est l'unique opérateur auto-adjoint borné inférieurement dans $L^2(\mathbb{R}^3)$, de domaine $D(H_\infty(\omega,V)) \subset \mathcal{Q}$, associé à la forme sesquilinéaire $h_\infty^{\omega,V}$ tel que :

$$\forall\, \phi \in \mathcal{Q},\ \forall\, \psi \in D(H_\infty(\omega,V)), \quad h_\infty^{\omega,V}(\phi,\psi) = \langle\phi, H_\infty(\omega,V)\psi\rangle \tag{1.16}$$

Preuve Proposition 1.9.
Définissons d'abord l'Hamiltonien magnétique libre par une extension de Friedrichs. Pour $\omega \in \mathbb{R}$, l'opérateur $\frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2$ défini sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ est symétrique et positif. Soit $h_\infty^{\omega,0} : \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3) \times \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3) \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire définie par :

$$h_\infty^{\omega,0}(\phi,\psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle \phi, (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)^2\psi\rangle$$

D'après le théorème X.23 dans [91], la forme $h_\infty^{\omega,0}$ est fermable et sa fermeture est la forme sesquilinéaire d'un unique opérateur auto-adjoint positif, noté $H_\infty(\omega,0)$. Aussi $H_\infty(\omega,0)$ est l'unique extension auto-adjointe de $\frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2$ dont le domaine soit contenu dans le domaine de forme de la fermeture de $h_\infty^{\omega,0}$.

Soit $V^+ \in \mathcal{K}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3)$. La forme sesquilinéaire $h_\infty^{\omega,V^+} : \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3) \times \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3) \to \mathbb{C}$ définie par :

$$h_\infty^{\omega,V^+}(\phi,\psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\langle (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\phi, (-i\partial_{x_j} - \omega a_j)\psi\rangle + \langle (V^+)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^+)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle$$

est densément définie dans $L^2(\mathbb{R}^3)$, symétrique et non-négative. D'après [99], sa fermeture a pour domaine $\mathcal{Q}$ défini en (1.14). En vertu du théorème VIII.15 dans [90], la forme h_∞^{ω,V^+} étendue au domaine $\mathcal{Q}$ définit un unique opérateur auto-adjoint non-négatif sur $L^2(\mathbb{R}^3)$, noté $H_\infty(\omega,V^+)$, de domaine $D(H_\infty(\omega,V^+)) \subset \mathcal{Q}$, tel que :

$$\forall\, \phi \in \mathcal{Q},\ \forall\, \psi \in D(H_\infty(\omega,V^+)), \quad h_\infty^{\omega,V^+}(\phi,\psi) = \langle \phi, H_\infty(\omega,V^+)\psi\rangle$$

Soit $V^- \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$. Soit $h_\infty^{\omega,V} : \mathcal{Q} \times \mathcal{Q} \to \mathbb{C}$ la forme sesquilinéaire symétrique définie par :

$$h_\infty^{\omega,V}(\phi,\psi) := h_\infty^{\omega,V^+}(\phi,\psi) - \langle (V^-)^{\frac{1}{2}}\phi, (V^-)^{\frac{1}{2}}\psi\rangle$$

D'après le théorème 15.10 dans [100], $V^- \in \mathcal{K}(\mathbb{R}^3)$ est $H_\infty(\omega,V^+)$-borné au sens des formes avec borne relative nulle. Par le théorème KLMN, la forme sesquilinéaire $h_\infty^{\omega,V}$ définie sur $\mathcal{Q}$ est fermée et bornée inférieurement, et il existe un unique opérateur auto-adjoint borné inférieurement, noté $H_\infty(\omega,V)$, de domaine $D(H_\infty(\omega,V)) \subset \mathcal{Q}$, vérifiant (1.16).

■

Remarque 1.10. $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ est un cœur de la forme sesquilinéaire $h_\infty^{\omega,V}$.

On termine ce paragraphe par ce dernier résultat :

Proposition 1.11. *Pour $\omega \in \mathbb{R}$, soit $E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega,V))$. Alors on a l'inégalité :*

$$\inf \sigma(H_\Lambda(\omega,V)) = e_1(\omega) \geq E_0(\omega) \tag{1.17}$$

Preuve Proposition 1.11.
Puisque $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$ est un cœur de la forme $h_\Lambda^{\omega,V}$ et $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ est un cœur de la forme $h_\infty^{\omega,V}$, d'après le principe du min-max (théorème XIII.2 dans [93]) :

$$\inf \sigma(H_\Lambda(\omega,V)) = \inf_{\psi\in\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda),\, \|\psi\|_2=1}\langle \psi, H_\Lambda(\omega,V)\psi\rangle$$

$$E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega,V)) = \inf_{\psi\in\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3),\, \|\psi\|_2=1}\langle \psi, H_\infty(\omega,V)\psi\rangle$$

Et par la convention d'extension de la section 2 :

$$\inf \sigma(H_\Lambda(\omega, V)) = \inf_{\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda),\, \|\psi\|_2 = 1} \langle \psi, H_\infty(\omega, V)\psi \rangle \geq E_0(\omega)$$

■

3.3 Hamiltonien du gaz quasi-parfait à nombre de particules fixé

On suppose ici que le gaz décrit dans le paragraphe 3.1 comporte un nombre entier N fixé de particules identiques et indiscernables.

Avant d'introduire l'Hamiltonien du gaz quasi-parfait de N particules identiques, rappelons la construction du produit tensoriel d'espaces de Hilbert. On se réfère pour cela à [9] ; une construction différente est proposée dans [90].

Soit $\mathfrak{h}_\Lambda := L^2(\Lambda)$ l'espace de Hilbert à une particule. Considérons l'espace vectoriel $\mathcal{E}$ engendré par les tenseurs formels $\phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_N$ avec $\phi_i \in \mathfrak{h}_\Lambda$, $i \in \{1, \ldots, N\}$. Cet espace est muni d'une unique forme sesquilinéaire positive $\langle \cdot\,, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}$ telle que :

$$\langle \phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_N, \phi_1^{'} \otimes \cdots \otimes \phi_N^{'} \rangle_{\mathcal{E}} = \prod_{i=1}^{N} \langle \phi_i, \phi_i^{'} \rangle_{\mathfrak{h}_\Lambda}$$

Le produit tensoriel des N espaces de Hilbert $\mathfrak{h}_{N,\Lambda} := \otimes_{i=1}^N \mathfrak{h}_\Lambda$ est par définiton le séparé complété de l'espace préhilbertien $\big(\mathcal{E}, \langle \cdot\,, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}\big)$. Il est à noter que les espaces de Hilbert $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$ et $L^2(\Lambda^N)$ sont isomorphes (voir par ex. [90]).

Compte-tenu de l'absence d'intéraction entre les particules, l'Hamiltonien du gaz quasi-parfait de N particules identiques agissant dans $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$ est défini comme la fermeture de l'opérateur $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$ défini par :

$$\forall\, \omega \in \mathbb{R}, \quad H_{N,\Lambda}(\omega, V) := \underbrace{H_\Lambda(\omega, V) \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{1^{\text{er}}\ \text{"terme"}} + \cdots + \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \otimes H_\Lambda(\omega, V)}_{N^{\text{ième}}\ \text{"terme"}} \tag{1.18}$$

où $H_\Lambda(\omega, V)$ est l'Hamiltonien à une particule. En effet, en vertu du corollaire du théorème VIII.33 dans [90], $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$ est densément défini sur $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$ et essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_{N,\Lambda}(\omega, V)) := \otimes_{i=1}^N \mathrm{Dom}(H_\Lambda(\omega, V))$, où $\mathrm{Dom}(H_\Lambda(\omega, V))$ désigne le domaine sur lequel $H_\Lambda(\omega, V)$ est essentiellement auto-adjoint.

Cette construction ne tient cependant pas compte de l'indiscernabilité des particules du gaz à l'origine de quelques restrictions. Montrons par un argument physique simple qu'il existe deux familles de particules indiscernables. Soit $\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$ un vecteur de $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$, supposé normalisé à l'unité, décrivant un état quantique du gaz. Etant donné que les positions possibles de chacune des particules forment un continuum, la probabilité pour que chaque particule se trouve dans un élément de volume $\mathrm{d}\mathbf{x}_j$ situé au point $\mathbf{x}_j$ est proportionnelle à $\mathrm{d}\mathbf{x}_1 \cdots \mathrm{d}\mathbf{x}_N$ et infinitésimale :

$$\mathrm{d}P(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N) = |\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}_1 \cdots \mathrm{d}\mathbf{x}_N$$

où on interprète $|\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)|^2$ comme la densité de probabilité correspondante.
Puisque les particules sont indiscernables, la densité de probabilité de présence doit rester invariante sous la permutation de deux coordonnées, ce qui implique :

$$|\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \ldots, \mathbf{x}_N)| = |\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i, \ldots, \mathbf{x}_N)|$$

On distingue alors deux cas :
(1) $\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \ldots, \mathbf{x}_N) = \Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i, \ldots, \mathbf{x}_N)$.
Φ est invariant sous la permutation de deux coordonnées, l'état est dit symétrique.
(2) $\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \ldots, \mathbf{x}_N) = -\Phi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i, \ldots, \mathbf{x}_N)$.
Φ est impaire sous la permutation de deux coordonnées, l'état est dit antisymétrique.

Définition 1.12. *On définit deux familles de particules indiscernables :*
(i). Les bosons dont les états sont symétriques sous la permutation de deux coordonnées. Les bosons satisfont à la statistique de Bose-Einstein.
(ii). Les fermions dont les états sont antisymétriques sous la permutation de deux coordonnées. Les fermions satisfont à la statistique de Fermi-Dirac.

On construit ci-dessous les espaces de Hilbert des états symétriques (pour les bosons) et antisymétriques (pour les fermions). On se réfère pour cela à [90].

Soit $\mathfrak{P}_N$ le groupe des permutations à N éléments. Pour tout vecteur $\phi_1, \ldots, \phi_N \in \mathfrak{h}_\Lambda$, introduisons les opérateurs $P_{N,\epsilon}$, avec $\epsilon = \pm 1$, définis sur $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$ par :

$$P_{N,-1}\big(\phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_N\big) = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathfrak{P}_N} \phi_{\pi_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{\pi_N} \tag{1.19}$$

$$P_{N,+1}\big(\phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_N\big) = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathfrak{P}_N} \sigma(\pi) \phi_{\pi_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{\pi_N} \tag{1.20}$$

où pour chaque permutation $\pi : (1, \ldots, N) \mapsto (\pi_1, \ldots, \pi_N)$, $\sigma : \mathfrak{P}_N \to \{-1, 1\}$ est la signature ; $\sigma = -1$ dans les permutations impaires, et $\sigma = +1$ dans les permutations paires. D'une part, les opérateurs $P_{N,\epsilon}$ s'étendent par linéarité aux opérateurs densément définis sur $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$, d'autre part ils s'étendent par continuité aux opérateurs bornés de norme unité. Les opérateurs $P_{N,\epsilon}$, $\epsilon = \pm 1$, sont des projecteurs orthogonaux : $P_{N,\epsilon}^2 = P_{N,\epsilon} = P_{N,\epsilon}^*$.

A partir des projecteurs $P_{N,\epsilon}$, $\epsilon = \pm 1$, on définit les espaces de Hilbert des états totalement symétriques (pour les bosons) et totalement antisymétriques (pour les fermions) :

Définition 1.13. *On définit l'espace des états totalement symétriques pour le gaz de N bosons et l'espace des états totalement antisymétriques pour le gaz de N fermions respectivement par :*

$$\mathfrak{h}_{N,\Lambda,-1} := P_{N,-1}\mathfrak{h}_{N,\Lambda}, \quad \mathfrak{h}_{N,\Lambda,+1} := P_{N,+1}\mathfrak{h}_{N,\Lambda} \tag{1.21}$$

Les espaces $\mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$, $\epsilon = \pm 1$, sont des espaces de Hilbert (comme sous-espaces vectoriels fermés de $\mathfrak{h}_{N,\Lambda}$) pour le produit scalaire induit.

Montrons formellement que la construction de l'espace de Hilbert $\mathfrak{h}_{N,\Lambda,+1}$ tient compte du principe d'exclusion de Pauli pour les fermions. Soient $\{e_j(\omega)\}_{j \geq 1}$ l'ensemble des valeurs propres (comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant) de l'Hamiltonien à une particule $H_\Lambda(\omega, V)$ et $\{\phi_j\}_{j \geq 1}$ l'ensemble des vecteurs propres correspondant. $\phi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{j_N}$, avec $j_i \in \mathbb{N}^*$, est alors un vecteur propre pour l'Hamiltonien à N particules $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$. Supposons que parmi les indices $j_1, \ldots, j_N$ il y en ait deux égaux $j_k = j_l$. Alors compte-tenu de (1.20), on a par antisymétrie :

$$P_{N,+1}(\phi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{j_k} \otimes \phi_{j_k} \otimes \cdots \otimes \phi_{j_N}) = 0$$

En d'autres termes, deux fermions ne peuvent occuper le même état quantique.

L'opérateur $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$ commute avec les projections sur les espaces de Hilbert symétrisé et antisymétrisé, et la restriction de $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$ à $\mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$, notée $H_{N,\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$, est essentiellement auto-adjointe sur $\mathrm{Dom}(H_{N,\Lambda}(\omega, V)) \cap \mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$ (voir [90]).

Ainsi sous les hypothèses (**H1**), (**H2**) et (**H3**) du paragraphe 3.1, on définit :

Définition 1.14. *Soit $\omega \in \mathbb{R}$. L'Hamiltonien décrivant la dynamique du gaz quasi-parfait de N particules identiques et indiscernables (cas $\epsilon = -1$ pour les bosons et $\epsilon = +1$ pour les fermions) sur l'espace de Hilbert $\mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$ est l'unique extension auto-adjointe de l'opérateur $H_{N,\Lambda,\epsilon}(\omega, V) := H_{N,\Lambda}(\omega, V) \restriction \mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$, (i.e. la restriction de $H_{N,\Lambda}(\omega, V)$ à $\mathfrak{h}_{N,\Lambda,\epsilon}$).*
Par la suite, on désignera cette extension par le même symbole.

En vertu du corollaire du théorème VIII.33 dans [90] et compte-tenu du principe d'exclusion de Pauli pour les fermions, on a :

Proposition 1.15. *Le spectre des opérateurs $H_{N,\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$, avec $\epsilon = \pm 1$, est discret :*

$$\sigma(H_{N,\Lambda,-1}(\omega, V)) = \overline{\left\{ \sum_{k=1}^{N} e_{j_k}(\omega), \quad j_1, \ldots, j_N \in \mathbb{N}^* \right\}}$$

$$\sigma(H_{N,\Lambda,+1}(\omega, V)) = \overline{\left\{ \sum_{k=1}^{N} e_{j_k}(\omega), \quad j_1, \ldots, j_N \in \mathbb{N}^*, \quad j_l \neq j_m \text{ lorsque } l \neq m \right\}}$$

3.4 Hamiltonien seconde quantifiée : nombre indéterminé de particules

On suppose que le gaz décrit dans le paragraphe 3.1 comporte un nombre indéterminé de particules identiques et indiscernables. Une telle situation se produit lorsque le système, constitué initialement du gaz quasi-parfait de N particules confinées dans Λ, est connecté à un réservoir de particules de même nature (identiques et indiscernables), cf. paragraphe 5.1.

Avant d'introduire l'Hamiltonien du gaz quasi-parfait d'un nombre indéterminé de particules identiques, rappelons la construction des espaces de Fock ; on se référera à [10].
On définit l'espace de Fock associé à l'espace de Hilbert $\mathfrak{h}_\Lambda := L^2(\Lambda)$ comme :

$$\mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{h}_{n,\Lambda}$$

où $\mathfrak{h}_{0,\Lambda} := \mathbb{C}$ par convention, $\mathfrak{h}_{1,\Lambda} := \mathfrak{h}_\Lambda$ et $\mathfrak{h}_{n,\Lambda} = \otimes_{k=1}^{n} \mathfrak{h}_\Lambda \cong L^2(\Lambda^n)$ pour $n \geq 2$ entier.
Ainsi un vecteur $\Psi \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda)$ est une suite $\{\psi_n\}_{n\geq 0}$, avec $\psi_n \in \mathfrak{h}_{n,\Lambda}$, et $\mathfrak{h}_{n,\Lambda}$ peut être identifié au sous-espace fermé de $\mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda)$ constitué par les vecteurs dont toutes les composantes, excéptée la n-ième, sont nulles. $\mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda)$ est un espace de Hilbert pour le produit scalaire :

$$\forall\, \Phi = (\phi_0, \ldots, \phi_N, \ldots),\ \Psi = (\psi_0, \ldots, \psi_N, \ldots) \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda), \quad \langle \Phi, \Psi \rangle_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda)} = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n, \psi_n \rangle_{\mathfrak{h}_{n,\Lambda}}$$

L'Hamiltonien seconde quantifiée de $H_\Lambda(\omega, V)$, noté $d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))$, agissant dans l'espace de Fock $\mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda)$ est formellement défini par :

$$\forall\, \omega \in \mathbb{R}, \quad d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V)) := \sum_{n=0}^{\infty} H_{n,\Lambda}(\omega, V) \tag{1.22}$$

où par convention $H_{0,\Lambda}(\omega, V) := 0$ et $\forall\, n \in \mathbb{N}^*$, $H_{n,\Lambda}(\omega, V)$ est défini en (1.18). D'après [90] (section VIII.10), $d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))$ est symétrique et essentiellement auto-adjoint sur :

$$\begin{aligned}\mathrm{Dom}(d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))) := \big\{\Psi = \{\psi_0, \psi_1, \ldots, \psi_N, \ldots,\} \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h}_\Lambda) \ : \\ \forall\, n \geq 0,\ \psi_n \in \mathrm{Dom}(H_{n,\Lambda}(\omega, V)),\ \text{ et } \psi_n = 0 \text{ pour } n \text{ suffisamment grand}\big\}\end{aligned} \tag{1.23}$$

avec $\mathrm{Dom}(H_{n,\Lambda}(\omega, V))$ le domaine sur lequel $H_{n,\Lambda}(\omega, V)$ est essentiellement auto-adjoint.

Afin de tenir compte de l'indiscernabilité des particules, on introduit (à partir des opérateurs de projection $P_{n,\epsilon}$, avec $n \geq 1$ et $\epsilon = \pm 1$, définis dans le paragraphe précédent) les espaces de Fock des états symétriques et antisymétriques de la manière suivante :

Définition 1.16. *L'espace de Fock des états totalement symétriques (ou espace de Fock de Bose) et l'espace de Fock des états totalement antisymétriques (ou espace de Fock de Fermi) sont respectivement définis par :*

$$\mathfrak{F}_{-1}(\mathfrak{h}_\Lambda) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} P_{n,-1}\mathfrak{h}_{n,\Lambda}, \quad \mathfrak{F}_{+1}(\mathfrak{h}_\Lambda) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} P_{n,+1}\mathfrak{h}_{n,\Lambda} \tag{1.24}$$

Les espaces $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$, avec $\epsilon = \pm 1$, sont des espaces de Hilbert pour le produit scalaire induit.

L'opérateur $d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))$ commute avec les projections sur les espaces de Fock symétrisé et antisymétrisé et la restriction de $d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))$ à $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$, notée $d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega, V))$, est essentiellement auto-adjointe sur $\mathrm{Dom}(d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V))) \cap \mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$ (voir [90]).

Ainsi sous les hypothèses (**H1**), (**H2**) et (**H3**) du paragraphe 3.1, on définit :

Définition 1.17. *L'Hamiltonien seconde quantifiée de $H_\Lambda(\omega, V)$ décrivant la dynamique du gaz quasi-parfait d'un nombre indéterminé de particules identiques et indiscernables (cas $\epsilon = -1$ pour les bosons et $\epsilon = +1$ pour les fermions) sur l'espace de Fock $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$ est l'unique extension auto-adjointe de l'opérateur $d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega, V)) := d\Gamma(H_\Lambda(\omega, V)) \restriction \mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$. Par la suite, on désignera cette extension par le même symbole.*

Remarque 1.18. On peut voir $d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega, V))$ comme l'unique opérateur auto-adjoint dont les restrictions à $\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$ coïncident avec $H_{n,\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$ (voir Définition 1.14).

3.5 Lorsque ω devient un paramètre complexe

Introduisons les opérateurs symétriques sur $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$ définis par :

$$s_{1,\Lambda}(\omega_0) := \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \big(i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x})\big) \quad \text{et} \quad s_{2,\Lambda} := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x}), \quad \omega_0 \in \mathbb{R} \tag{1.25}$$

où pour tout $\mathbf{x} \in \Lambda$, $\mathbf{a}^2(\mathbf{x})$ désigne le produit scalaire $\mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{x})$.
Pour tout couple $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$, avec $\delta\omega := \omega - \omega_0$, introduisons sur $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda)$ l'opérateur :

$$H_\Lambda(\omega, V) := H_\Lambda(\omega_0, V) + s_\Lambda(\omega, \omega_0), \quad \text{avec} \quad s_\Lambda(\omega, \omega_0) := \delta\omega s_{1,\Lambda}(\omega_0) + (\delta\omega)^2 s_{2,\Lambda} \tag{1.26}$$

On montre dans ce paragraphe que $\{H_\Lambda(\omega, V),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est une famille d'opérateurs m-sectoriels analytique de type (A) (terminologie Kato, voir V.3.10 et VII.2 dans [60]).

Lemme 1.19. $\{H_\Lambda(\omega, V),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ *est une famille analytique de type (A).*

Preuve Lemme 1.19.
Soit $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$. Les notations utilisées sont celles de la preuve de la Proposition 1.4. Soit $\varphi \in D(H_\Lambda(\omega_0, V)) \subset \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega_0, V)) = \mathcal{Q}(H_\Lambda(0,0))$ tel que $\|\varphi\|_2 = 1$. On a :

$$\frac{1}{2}\|(i\nabla+\omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\varphi\|_2^2 = h_\Lambda^{\omega_0,0}(\varphi,\varphi) \leq h_\Lambda^{\omega_0,V}(\varphi,\varphi)+|\langle (V^+)^{\frac{1}{2}}\varphi, (V^+)^{\frac{1}{2}}\varphi\rangle|+\langle (V^-)^{\frac{1}{2}}\varphi, (V^-)^{\frac{1}{2}}\varphi\rangle \tag{1.27}$$

Comme V^+ et V^- sont tout deux $H_\Lambda(\omega_0, 0)$-bornés au sens des formes avec borne relative nulle (voir Etape 3, preuve Proposition 1.4), alors pour tout $\nu > 0$ il existe $\nu^{'} \in \mathbb{R}$ tel que :

$$|\langle (V^\pm)^{\frac{1}{2}}\varphi, (V^\pm)^{\frac{1}{2}}\varphi\rangle| \leq \nu h_\Lambda^{\omega_0,0}(\varphi,\varphi) + \nu^{'}$$

On déduit de l'inégalité (1.27) que pour tout $\epsilon \in (0,1)$, il existe $\epsilon^{'} \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\frac{1}{2}\|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\varphi\|_2^2 \leq \frac{1}{1-\epsilon}\langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle + \frac{\epsilon^{'}}{1-\epsilon} \tag{1.28}$$

Puis par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, pour tout $\epsilon > 0$, il existe un autre $\epsilon^{'} \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\frac{1}{2}\|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\varphi\|_2 \leq \epsilon\|H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\|_2 + \epsilon^{'} \tag{1.29}$$

Compte-tenu de l'estimation (1.10), (1.29) implique que l'opérateur $s_{1,\Lambda}(\omega_0)$ est $H_\Lambda(\omega_0, V)$-borné au sens des opérateurs avec borne relative nulle. Idem pour l'opérateur $s_{2,\Lambda}$ puisque $\|s_{2,\Lambda}\varphi\|_2 \leq a_\infty^2/2$. Il s'ensuit que $s_\Lambda(\omega, \omega_0)$ est $H_\Lambda(\omega_0, V)$-borné avec borne relative nulle. Le théorème IV.1.1 dans [60] assure que l'opérateur $H_\Lambda(\omega, V)$ est fermé sur le domaine $D(H_\Lambda(\omega_0, V)) = D(H_\Lambda(0, V))$ indépendant de ω. Il reste à utiliser que $H_\Lambda(\omega, V)\phi$, avec $\phi \in D(H_\Lambda(0, V))$, est analytique pour conclure la preuve.

■

Remarque 1.20. Toutes les constantes ν, $\nu^{'}$ et ϵ, $\epsilon^{'}$ apparaissant dans la preuve ci-dessus peuvent être choisies indépendantes du domaine Λ (voir par ex. [21]).

Remarque 1.21. Comme $H_\Lambda(0, V)$ est à résolvante compacte (cf. Proposition 1.8), en vertu de la théorie des perturbations analytiques (voir par ex. [60]), $H_\Lambda(\omega, V)$, avec $\omega \in \mathbb{C}$, est également à résolvante compacte. Par conséquent, $H_\Lambda(\omega, V)$ n'a que du spectre discret.

Remarque 1.22. Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\varphi \in D(H_\infty(\omega_0, V)) \subset \mathcal{Q}$ (cf. Proposition 1.9) avec $\|\varphi\|_2 = 1$. V^- étant $H_\infty(\omega_0, V^+)$-borné au sens des formes avec borne relative nulle, alors :

$$\forall\, \nu \in (0,1)\ \ \exists\, \nu^{'} \in \mathbb{R}\ \ :\ \ \frac{1}{2}\|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\varphi\|_2^2 \leq \frac{1}{1-\nu}\langle \varphi, H_\infty(\omega_0, V)\varphi\rangle + \frac{\nu^{'}}{1-\nu}$$

Puisque $\inf \sigma(H_\infty(\omega_0, 0)) = |\omega_0|/2$ (voir [4]), on déduit de l'inégalité ci-dessus qu'il existe deux constantes $a, b > 0$ telles que :

$$E_0(\omega_0) \geq a|\omega_0| - b \tag{1.30}$$

Lemme 1.23. $\{H_\Lambda(\omega, V),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ *est une famille d'opérateurs m-sectoriels.*

Preuve Lemme 1.23.
Soit $\omega \in \mathbb{C}$, $\Re\omega = \omega_0$ et $\Im\omega = \omega_1$. Soit $\varphi \in D(H_\Lambda(\omega_0, V)) \subset \mathcal{Q}(H_\Lambda(\omega_0, V))$ avec $\|\varphi\|_2 = 1$. Remarquons d'abord que :

$$\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle = \langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle - \frac{\omega_1^2}{2}\langle \varphi, \mathbf{a}^2\varphi\rangle + i\omega_1\langle \varphi, \mathbf{a}\cdot(i\nabla + \omega_0\mathbf{a})\varphi\rangle$$

D'une part, en utilisant l'estimation (1.10) sur le potentiel vecteur magnétique :

$$\Re\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle = \langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle - \frac{\omega_1^2}{2}\langle \varphi, \mathbf{a}^2\varphi\rangle \geq \langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle - \frac{\omega_1^2}{2}a_\infty^2 \tag{1.31}$$

D'autre part, à partir de (1.28), il existe deux constantes $c > 0$ et $c' > |E_0(\omega_0)|$ telles que :

$$|\Im\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle| = |\omega_1\langle \varphi, \mathbf{a}\cdot(i\nabla + \omega_0\mathbf{a})\varphi\rangle| \leq c|\omega_1|a_\infty\sqrt{\langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle + c'} \tag{1.32}$$

Soit $\Theta(H_\Lambda(\omega, V))$ l'image numérique de $H_\Lambda(\omega, V)$, i.e. l'ensemble des nombres complexes $\langle u, H_\Lambda(\omega, V)u\rangle$ où $u \in D(H_\Lambda(\omega, V))$, $\|u\|_2 = 1$. En utilisant (1.31) et (1.32), il vient :

$$\Theta(H_\Lambda(\omega, V)) \subset \Big\{\xi \in \mathbb{C} \,:\, |\Im\xi| \leq c|\omega_1|a_\infty\sqrt{\Re\xi + c' + \frac{\omega_1^2}{2}a_\infty^2},\ \ \Re\xi \in \big[E_0(\omega_0) - \frac{\omega_1^2 a_\infty^2}{2}, +\infty\big)\Big\} \tag{1.33}$$

$\Theta(H_\Lambda(\omega, V))$ étant un un sous-ensemble de $\{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Re\xi \geq E_0(\omega_0) - \omega_1^2 a_\infty^2/2\}$, l'opérateur $H_\Lambda(\omega, V)$ est quasi-accrétif (voir section V.3.10, [60]). Il est même quasi-m-accrétif puisque pour $\xi \in \mathbb{C}$ avec $|\Re\xi| < E_0(\omega)$ choisi suffisamment grand, $\mathrm{Ran}(H_\Lambda(\omega, V) - \xi) = L^2(\Lambda)$.
Posons $\gamma_\delta(\omega) := -\delta + E_0(\omega_0) - \frac{\omega_1^2}{2}a_\infty^2$ avec $\delta > 0$. On a :

$$\left|\frac{\Im\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle}{\Re\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle - \gamma_\delta(\omega)}\right| \leq c|\omega_1|a_\infty g\big(\langle \varphi, H_\Lambda(\omega_0, V)\varphi\rangle\big)$$

où $[E_0(\omega_0), +\infty) \ni t \mapsto g(t) := \dfrac{\sqrt{t + c' + \delta}}{t + \delta - E_0(\omega_0)}$. Comme pour tout $t \in [E_0(\omega_0), +\infty)$,

$$\frac{d}{dt}g(t) = \frac{t + \delta - E_0(\omega_0) - 2(t + c' + \delta)}{2\sqrt{t + c' + \delta}(t + \delta - E_0(\omega_0))^2} = -\frac{t + \delta + E_0(\omega_0) + 2c'}{2\sqrt{t + c' + \delta}(t + \delta - E_0(\omega_0))^2} < 0$$

alors $g(\cdot)$ est une fonction strictement décroissante sur $[E_0(\omega_0), +\infty)$.
En conséquence, pour tout $\delta > 0$, $\Theta(H_\Lambda(\omega, V))$ est un sous-ensemble d'un secteur :

$$\mathcal{S}_{\theta_\delta}(\omega) := \Big\{\xi \in \mathbb{C} \ :\ |\arg(\xi - \gamma_\delta(\omega))| \leq \theta_\delta(\omega) < \frac{\pi}{2}\Big\} \tag{1.34}$$

de demi-angle $\theta_\delta(\omega)$ et de vertex $\gamma_\delta(\omega)$ respectivement définis par :

$$\theta_\delta(\omega) := \arctan\Big(c|\omega_1|a_\infty\frac{\sqrt{E_0(\omega_0) + \delta + c'}}{\delta}\Big) \tag{1.35}$$

$$\gamma_\delta(\omega) := -\delta + E_0(\omega_0) - \frac{\omega_1^2}{2}a_\infty^2 \tag{1.36}$$

Au final, l'opérateur $H_\Lambda(\omega, V)$ est quasi-m-accretif et sectoriel, il est donc m-sectoriel. Par conséquent, son spectre $\sigma(H_\Lambda(\omega, V))$ est un sous-ensemble du secteur $\mathcal{S}_{\theta_\delta}(\omega)$ (voir [60]).

■

Remarque 1.24. Par la suite, on fixera $\delta = \delta_0 > 0$ dans la définition (1.34) du secteur.

Remarque 1.25. Soient $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$ tels que $|\delta\omega|$ soit suffisamment petit. Alors pour tout $\varphi \in D(H_\Lambda(\omega_0, V))$ tel que $\|\varphi\|_2 = 1$, on déduit de (1.31) sachant (1.17) :

$$\Re\langle \varphi, H_\Lambda(\omega, V)\varphi\rangle \geq E_0(\omega_0) + \mathcal{O}(|\delta\omega|)$$

Remarque 1.26. Soit $\omega \in \mathbb{C}$. D'après la preuve précédente, l'extérieur du secteur $\mathcal{S}_{\theta_{\delta_0}}(\omega)$ est un sous-ensemble de l'ensemble résolvant $\rho(H_\Lambda(\omega, V))$. Il s'ensuit alors (voir [91]) :

$$\forall\, \xi \notin \mathcal{S}_{\theta_{\delta_0}}(\omega), \quad \|(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1}\| \leq \frac{1}{\mathrm{dist}(\xi, \mathcal{S}_{\theta_{\delta_0}}(\omega))}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme opérateur. Cela assure que pour tout $\epsilon > 0$, il existe une constante $c_\epsilon > 0$ telle que pour tout $\xi \in \mathbb{C}$ satisfaisant $|\arg(\xi - \gamma_{\delta_0}(\omega))| \geq \theta_{\delta_0}(\omega) + \epsilon$:

$$\|(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1}\| \leq \frac{c_\epsilon}{|\xi - \gamma_{\delta_0}(\omega)|}, \quad c_\epsilon := \frac{1}{\sin\epsilon} \tag{1.37}$$

4 Semi-groupe à un paramètre

Cette section se décompose en deux parties. La première est consacrée à la définition et aux propriétés du semi-groupe à un paramètre de générateur $H_X(\omega, V)$, avec $X = \Lambda$ ou $X = \mathbb{R}^3$, sur les espaces $L^p(X)$, $p \geq 1$. Dans la seconde partie, on établit des estimations sur la norme Hilbert-Schmidt et la norme trace du semi-groupe à un paramètre de générateur $H_\Lambda(\omega, V)$. On transfère ensuite ces estimations sur les puissances de la résolvante à volume fini par l'intermédiaire de la transformation de Laplace.

4.1 Définition et propriétés du semi-groupe à un paramètre

Sauf mention explicite du contraire, $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ désigne un ouvert borné simplement connexe. Souvent on utilisera la notation X pour désigner indifféremment Λ ou $\mathbb{R}^3 \equiv \infty$. Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, l'opérateur $H_X(\omega, V)$ est défini dans la Proposition 1.4 (cas $X = \Lambda$) et dans la Proposition 1.9 (cas $X = \mathbb{R}^3 \equiv \infty$) sous les hypothèses du paragraphe 3.1.
On se réferera à [112] pour les définitions et à [21], [101] pour les preuves des résultats.

Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, le semi-groupe à un paramètre de générateur $H_X(\omega, V)$ défini par :

$$\left\{W_X(\beta, \omega, V) := \mathrm{e}^{-\beta H_X(\omega, V)} \ : \ L^p(X) \to L^q(X)\right\}_{\beta \geq 0} \quad 1 \leq p \leq q \leq \infty$$

est fortement continu, c'est-à-dire :

$$\forall\, \beta \geq 0, \quad \lim_{\beta' \to \beta} \|(W_X(\beta, \omega, V) - W_X(\beta', \omega, V))\psi\|_p = 0 \quad \forall\, \psi \in L^p(X),\ 1 \leq p < \infty$$

De plus il satisfait l'inégalité diamagnétique :

$$\forall\, \beta \geq 0, \quad |W_X(\beta, \omega, V)\psi| \leq W_X(\beta, 0, V)|\psi| \quad \forall\, \psi \in L^p(X),\ 1 \leq p \leq \infty \tag{1.38}$$

ainsi que la propriété de monotonie : pour $\Lambda \subseteq \Lambda' \subseteq \mathbb{R}^3$,

$$\forall\, \beta \geq 0, \quad W_\Lambda(\beta, 0, V)\chi_\Lambda \psi \leq W_{\Lambda'}(\beta, 0, V)\psi \quad \forall\, \psi \in L^p(\Lambda'),\ 1 \leq p \leq \infty,\ \psi \geq 0$$

Enfin pour tout $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$, $W_X(\beta, \omega, V) : L^p(X) \to L^q(X)$, $1 \leq p \leq q \leq \infty$, est borné. En particulier, il existe des constantes $c > 0$ et $C > -\inf \sigma(H_\infty(0, V)) := -E_0(0)$ ne dépendant que de V (i.e. indépendantes de Λ, β, ω, p et q) telles que :

$$\forall\, \beta > 0,\ \forall\, \omega \in \mathbb{R}, \quad \|W_X(\beta, \omega, V)\|_{p,q} \leq \|W_X(\beta, 0, V)\|_{p,q} \leq \|W_\infty(\beta, 0, V)\|_{p,q} \tag{1.39}$$

avec :

$$\|W_\infty(\beta, 0, V)\|_{p,q} \leq \begin{cases} c\beta^{-\frac{3}{2}\left(\frac{1}{p}-\frac{1}{q}\right)}\mathrm{e}^{C\beta} & \text{pour } 1 \leq p < q \leq +\infty \\ c\mathrm{e}^{C\beta} & \text{pour } 1 \leq p = q \leq +\infty \end{cases} \tag{1.40}$$

Remarque 1.27. La constante C dans (1.40) peut être choisie comme n'importe quel réél strictement plus grand que $-E_0(0)$. Par la suite, on choisira cette constante comme :

$$C_0 := \max\{1, -E_0(0) + 1\} > 0 \tag{1.41}$$

Lorsque $p = 2 = q$, l'estimation (1.40) fournit une estimation sur la norme opérateur $\|W_\Lambda(\beta, \omega, V)\|$ uniforme en Λ et en ω, i.e. il existe une constante $c > 0$ telle que :

$$\forall\, \beta > 0,\ \forall\, \omega \in \mathbb{R}, \quad \|W_\Lambda(\beta, \omega, V)\| \leq c\mathrm{e}^{C_0\beta} \tag{1.42}$$

Maintenant on se limite aux propriétés du semi-groupe sur l'espace de Hilbert $L^2(X)$. Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, l'opérateur $W_X(\beta, \omega, V)$ est auto-adjoint et positif d'après le théorème spectral et le calcul fonctionnel pour les fonctions d'opérateurs auto-adjoints non-bornés. Aussi pour tout $\beta > 0$ et pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, $W_X(\beta, \omega, V)$ étant borné de $L^2(X) \to L^\infty(X)$, le théorème de Dunford-Pettis (voir par ex. [101], [106]) assure que $W_X(\beta, \omega, V)$ est un opérateur intégral dans le sens :

$$\forall\, \varphi \in L^2(X), \quad \big(W_X(\beta, \omega, V)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_X \mathrm{d}\mathbf{y}\, G_X(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, V)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x} \in X$$

D'après [21], le noyau intégral $G_X(\cdot\,, \cdot\,; \cdot\,, \omega, V)$ est continu en $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \beta) \in X \times X \times (0, +\infty)$; et il existe une constante $c > 0$ ne dépendant que de V telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \beta, \omega) \in X \times X \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R},\ |G_X(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, V)| \leq G_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, 0, V) \leq \frac{c}{\beta^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{C_0\beta}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4\beta}} \tag{1.43}$$

La première inégalité dans (1.43) est une conséquence de l'inégalité diamagnétique (1.38).

4.2 Estimations en norme Hilbert-Schmidt et norme trace

Par la suite, $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ désignera l'espace de Banach des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$. L'espace de Banach $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$ des opérateurs à trace et l'espace de Hilbert $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$ des opérateurs de Hilbert-Schmidt sont respectivement définis par :

$$\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda)) := \big\{\, T \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda)) \ :\ \|T\|_{\mathfrak{I}_1} < +\infty \,\big\}, \quad \|T\|_{\mathfrak{I}_1} := \mathrm{Tr}|T| = \mathrm{Tr}\sqrt{T^*T}$$
$$\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda)) := \big\{\, T \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda)) \ :\ \|T\|_{\mathfrak{I}_2} < +\infty \,\big\}, \quad \|T\|_{\mathfrak{I}_2} := (\mathrm{Tr}|T|^2)^{\frac{1}{2}} = (\mathrm{Tr}(T^*T))^{\frac{1}{2}}$$

où pour un opérateur T positif, $\mathrm{Tr}(T) := \sum_{n=1}^{\infty}\langle\phi_n, T\phi_n\rangle$ est indépendante de la base hilbertienne $\{\phi_n\}_{n\geq 1}$. Notons qu'on a les inclusions : $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda)) \subset \mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda)) \subset \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$. Aussi $\mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$, $j \in \{1,2\}$, est un idéal bilatère de $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$: si $A \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$ et $B \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ alors $AB \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$. De plus, le produit de deux opérateurs de Hilbert-Schmidt est un opérateur à trace : si $A, B \in \mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$ alors $AB \in \mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$.

Le lemme ci-dessous (dont la preuve est en annexe) donne des estimations sur les normes $\|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|_{\mathfrak{I}_1}$ et $\|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|_{\mathfrak{I}_2}$ à partir de l'estimation (1.43) sur le noyau intégral :

Lemme 1.28. *$W_\Lambda(\beta,\omega,V)$ est un opérateur à trace, i.e. il existe une constante $c > 0$ ne dépendant que de V telle que :*

$$\forall\,\beta > 0,\ \forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|_{\mathfrak{I}_1} \leq c\beta^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{C_0\beta}|\Lambda| \tag{1.44}$$

avec $C_0 > 0$ la constante définie en (1.41)*. De plus, sa norme Hilbert-Schmidt satisfait :*

$$\forall\,\beta > 0,\ \forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c\beta^{-\frac{3}{4}}\mathrm{e}^{C_0\beta}|\Lambda|^{\frac{1}{2}} \tag{1.45}$$

pour une autre constante $c > 0$ ne dépendant que de V.

On souhaite maintenant obtenir des estimations sur la norme trace et la norme Hilbert-Schmidt des puissances entières de la résolvante à volume fini.

Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $\xi_0 \in \rho(H_X(\omega,V))$ tel que $\Re\xi_0 < \inf\sigma(H_X(\omega,V))$. Pour tout réél $\alpha > 0$, l'opérateur $(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}$ peut être défini par le calcul fonctionnel comme opérateur borné dans $L^2(X)$ (voir par ex. [93]). L'opérateur $(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}$ peut également être défini dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ par une transformation de Laplace (monolatérale) du semi-groupe $W_X(\beta,\omega,V)$ (voir par ex. [60]) ; en désignant par $\tilde{\Gamma}(\cdot)$ la fonction gamma d'Euler :

$$(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha} = \frac{1}{\tilde{\Gamma}(\alpha)}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\, t^{\alpha-1}\mathrm{e}^{\xi_0 t}W_X(t,\omega,V), \quad \alpha \in \mathbb{R}_+^* \tag{1.46}$$

A partir de (1.46), on établit maintenant une série d'estimations uniformes en Λ et $\omega \in \mathbb{R}$. Pour cela, choisissons $\xi_0 \in \rho(H_X(\omega,V))$ tel que $\Re\xi_0 < -C_0$. L'intégrale en (1.46) est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(X))$, i.e. il existe $c > 0$ dépendant de V telle que :

$$\forall\,\alpha > 0,\ \forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}\| \leq c(-(\Re\xi_0 + C_0))^{-\alpha}$$

Considérons seulement le cas $\alpha \in \mathbb{N}^*$. La transformation de Laplace permet d'obtenir à partir de (1.40) que pour tout $1 \leq p \leq q \leq \infty$ vérifiant $1/p - 1/q < 2\alpha/3$, $(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-1}$ est borné de $L^p(X) \to L^q(X)$:

$$\forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}\|_{p,q} \leq \|(H_\infty(0,V)-\Re\xi_0)^{-\alpha}\|_{p,q} < +\infty \tag{1.47}$$

L'opérateur $(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{N}^*$, étant borné de $L^2(X) \to L^\infty(X)$, le théorème de Dunford-Pettis assure que $(H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}$ est un opérateur intégral dans le sens :

$$\forall\,\varphi \in L^2(X),\ \big((H_X(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_X \mathrm{d}\mathbf{y}\, R_X^{(\alpha)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi_0)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x} \in X \tag{1.48}$$

Son noyau intégral vérifie en vertu de (1.47) :

$$\forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad |R_X^{(\alpha)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi_0)| \leq R_\infty^{(\alpha)}(\mathbf{x},\mathbf{y};0,V,\Re\xi_0) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x},\mathbf{y} \in X$$

Remarque 1.29. L'étude de la régularité des noyaux $R_X^{(\alpha)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\xi_0)$ ainsi que leur estimation font l'objet du chapitre 3. Les résultats seront établis pour tout $\xi \in \rho(H_X(\omega,V))$.

Enfin la transformation de Laplace (1.46) permet de transférer les estimations du Lemme 1.28 sur les puissances de la résolvante à volume fini ($X = \Lambda$) :

Lemme 1.30. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega,V))$, avec $\Re\xi_0 < E_0(\omega)$ et $|\Re\xi_0|$ assez large. Alors $(H_\Lambda(\omega,V)-\xi_0)^{-1}$ est un opérateur de Hilbert-Schmidt, i.e. il existe une constante $c = c_{\xi_0} > 0$ dépendant de V telle que :*

$$\forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|(H_\Lambda(\omega,V)-\xi_0)^{-1}\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c|\Lambda|^{\frac{1}{2}} \tag{1.49}$$

De plus pour tout entier $\alpha \geq 2$, $(H_\Lambda(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}$ est un opérateur à trace, i.e. il existe une autre constante $c = c_{\alpha,\xi_0} > 0$ dépendant de V telle que :

$$\forall\,\omega \in \mathbb{R}, \quad \|(H_\Lambda(\omega,V)-\xi_0)^{-\alpha}\|_{\mathfrak{I}_1} \leq c|\Lambda| \tag{1.50}$$

5 Grandeurs caractéristiques du gaz quantique quasi-parfait

On introduit dans cette section les principales grandeurs à volume fini décrivant les propriétés statistiques du gaz quantique quasi-parfait introduit dans le paragraphe 3.1. Le chapitre 2 sera consacré à l'étude des propriétés de ces grandeurs caractéristiques de la réponse (dia)magnétique.

5.1 Grandeurs caractéristiques dans l'ensemble grand-canonique

Considérons le système, noté $\mathfrak{S}$, formé du gaz quantique quasi-parfait décrit dans le paragraphe 3.1 comportant initialement un grand nombre de particules (identiques et indiscernables). On met en contact $\mathfrak{S}$ avec un réservoir $\mathfrak{R}$ de chaleur et de particules (identiques et de même nature que $\mathfrak{S}$) permettant ainsi des échanges libres de chaleur et de particules. On suppose que $\mathfrak{S} \cup \mathfrak{R}$ forme un système macroscopique à l'équilibre et isolé (hypothèses fondamentales pour appliquer le postulat microcanonique de la mécanique statistique).
Dès que $\mathfrak{S}$ a atteint son état d'équilibre, on dit qu'il se trouve dans la situation grand-canonique. Son état est alors déterminé par la donnée de la température $T > 0$ et du potentiel chimique μ fixés de l'extérieur par le réservoir $\mathfrak{R}$.

Dans l'ensemble grand-canonique de la mécanique statistique, soit $(\beta, z, |\Lambda|)$ le jeu de paramètres extérieurs où $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ est "l'inverse" de la température T (k_B désigne la constante de Boltzmann), $z := \mathrm{e}^{\beta\mu}$ est la fugacité (μ désigne le potentiel chimique) et $|\Lambda|$ est le volume occupé par le système $\mathfrak{S}$ (i.e. le volume du confinement).

Avant d'introduire la fonction de partition grand-canonique comportant toutes les informations statistiques du système $\mathfrak{S}$ à l'équilibre, rappelons quelques notations introduites dans les paragraphes 3.3 et 3.4. (en particulier, voir Définitions 1.13 et 1.16).

Soit $\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$ le sous-espace fermé de l'espace de Hilbert $\mathfrak{h}_{n,\Lambda} := \otimes_{j=1}^n \mathfrak{h}_\Lambda \cong L^2(\Lambda^n)$ à $n \geq 1$ particules, constitué des fonctions totalement symétriques pour $\epsilon = -1$, totalement antisymétriques pour $\epsilon = +1$. Soit $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda) := \oplus_{n\geq 0}\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$, avec par convention $\mathfrak{h}_{0,\Lambda,\epsilon} := \mathbb{C}$, l'espace de Fock de Bose pour $\epsilon = -1$, de Fermi pour $\epsilon = +1$.
Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, soit $d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega,V))$ l'Hamiltonien seconde quantifiée de $H_\Lambda(\omega,V)$ défini comme l'unique opérateur auto-adjoint sur $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$ dont les restrictions à $\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$ coïncident

avec $H_{n,\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$, la restriction à $\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$ de l'Hamiltonien à n particules $H_{n,\Lambda}(\omega, V)$.

Soit $\mathcal{N}$ l'opérateur "nombre de particules" sur l'espace de Fock $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$ défini comme l'unique extension auto-adjointe de la multliplication par n sur chaque $\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}$.

Soient $\beta > 0$ et $E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega, V))$. Soient I_ϵ et J_ϵ les intervalles[2] définis par :

$$I_{-1} = I_{-1}(E_0(\omega)) := (0, \mathrm{e}^{\beta E_0(\omega)}), \quad I_{+1} := (0, +\infty)$$
$$J_{-1} = J_{-1}(E_0(\omega)) := (-\infty, E_0(\omega)), \quad J_{+1} := (-\infty, +\infty)$$

Définition 1.31. *Fonction de partition grand-canonique (voir par ex. [95])*
Pour $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\mu \in J_\epsilon$, la fonction de partition grand-canonique est définie par :

$$\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) := \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)} \exp\big\{ -\beta\big[d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega, V)) - \mu\mathcal{N}\big]\big\} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}_{n,\Lambda,\epsilon}} \mathrm{e}^{-\beta H_{n,\Lambda,\epsilon}(\omega,V)} \tag{1.51}$$

Remarque 1.32. D'après [14] (cf. propositions 5.2.22 et 5.2.27), on a equivalence entre :
(i). $W_\Lambda(\beta, \omega, V) := \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega,V)}$ est à trace sur $L^2(\Lambda)$.
(ii). $\exp\{-\beta[d\Gamma_\epsilon(H_\Lambda(\omega, V)) - \mu\mathcal{N}]\}$ est à trace sur $\mathfrak{F}_\epsilon(\mathfrak{h}_\Lambda)$ pour tout $\mu \in I_\epsilon$.
Ainsi la fonction de partition grand-canonique (1.51) est bien définie en vertu de (1.44).

On définit successivement la pression, la densité et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini :

Définition 1.33. *Pression et densité grand-canonique à volume fini (voir par ex. [55])*
Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$. Supposons que $0 < \Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) < +\infty$.
Alors la pression grand-canonique à volume fini est définie par :

$$P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln\big(\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)\big) \tag{1.52}$$

Supposons de plus que $z \mapsto \Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ soit dérivable. Alors la densité de particules grand-canonique à volume fini est définie par :

$$\rho_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{\partial P_\Lambda}{\partial \mu}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \beta z \frac{\partial P_\Lambda}{\partial z}(\beta, \omega, z, \epsilon) \tag{1.53}$$

Définition 1.34. *Susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini (voir [16])*
Soient $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$. Supposons que $\omega \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ soit une fonction de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un intervalle centré en ω_0.
Alors les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini sont définies par :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}^n_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \frac{\partial^n P_\Lambda}{\partial B^n}(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n P_\Lambda}{\partial \omega^n}(\beta, \omega_0, z, \epsilon) \tag{1.54}$$

Remarque 1.35. D'après [55], les cas $n = 1$ et $n = 2$ correspondent respectivement à l'aimantation et à la susceptibilité magnétique grand-canonique par unité de volume.
Plus précisément, le cas $n = 2$ correspond en fait à la contribution, à la susceptibilité magnétique, liée aux moments magnétiques orbitaux des particules du gaz confiné puisque le spin des particules n'est pas considéré dans notre modèle, voir paragraphe 3.1.

[2] L'intervalle $I_{-1}(E_0(\omega)) = \mathrm{e}^{\beta J_{-1}(E_0(\omega))}$ est choisi indépendant de Λ pour les besoins du chapitre 5. Cependant, les résultats énoncés peuvent être étendus à $I_{-1}(e_1(\omega)) \supseteq I_{-1}(E_0(\omega))$, $e_1(\omega) := \inf \sigma(H_\Lambda(\omega, V))$.

Utilisant les propriétés du spectre de l'opérateur $H_{n,\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$ (voir Proposition 1.15), la somme infinie dans le membre de droite de (1.51) peut être réécrite comme un produit de sommes indépendantes. On obtient ainsi une expression pour la fonction de partition grand-canonique faisant intervenir directement les valeurs propres $\{e_j(\omega)\}_{j\geq 1}$ de l'Hamiltonien à une particule $H_\Lambda(\omega, V)$ (voir [14] pour le détail des calculs) :

Proposition 1.36. *Pour tout $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$:*

$$0 < \Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = \prod_{j=1}^{\infty} (1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)})^\epsilon < +\infty \tag{1.55}$$

où $\{e_j(\omega)\}_{j\geq 1}$ est l'ensemble des valeurs propres de $H_\Lambda(\omega, V)$ comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant.

Utilisant maintenant la Définition 1.33, on déduit de (1.55) :

Proposition 1.37. *Pour tout $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$:*

$$P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \sum_{j=1}^{\infty} \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}) \tag{1.56}$$

$$\rho_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z\mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}}{1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}} \tag{1.57}$$

Remarque 1.38. En vertu du fait que le semi-groupe $W_\Lambda(\beta, \omega, V)$ soit un opérateur positif et à trace, on a $\|W_\Lambda(\beta, \omega, V)\|_{\mathfrak{I}_1} = \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)} = \sum_{j=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)} < +\infty$. Les séries dans (1.56) et (1.57) sont par conséquent absolument convergentes.

On donne maintenant une autre représentation de la pression grand-canonique à volume fini (1.56) à l'aide du calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir par ex. [44]). Pour cela, on a besoin du lemme suivant dont la preuve se trouve en annexe :

Lemme 1.39. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$.*
(i). Pour tout $z \in I_{+1}$, la fonction $\xi \mapsto \mathfrak{f}_{+1}(\beta, z; \xi) := \ln\left(1 + z\mathrm{e}^{-\beta\xi}\right)$ est holomorphe sur :

$$\mathfrak{C}_{+1} := \left\{\xi \in \mathbb{C} \ : \ \Im\xi \in (-\pi/\beta, \pi/\beta)\right\} \tag{1.58}$$

(ii). Soit $z \in I_{-1}(E_0(\omega))$ et $K \subset I_{-1}(E_0(\omega))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Soit $\alpha(\omega)$ un réél vérifiant $-\infty < \alpha(\omega) \leq E_0(\omega)$ tel que $K \subset I_{-1}(\alpha(\omega)) \subseteq I_{-1}(E_0(\omega))$. Alors la fonction $\xi \mapsto \mathfrak{f}_{-1}(\beta, z; \xi) := \ln\left(1 - z\mathrm{e}^{-\beta\xi}\right)$ est holomorphe sur :

$$\mathfrak{C}_{-1} := \left\{\xi \in \mathbb{C} \ : \ \Im\xi \in (-\pi/\beta, \pi/\beta), \ \Re\xi \geq \alpha(\omega)\right\} \tag{1.59}$$

Par la suite, γ_ϵ avec $\epsilon = \pm 1$ désignera le contour orienté positivement de la forme :

$$\gamma_\epsilon := \left\{\delta_\epsilon(\omega) + iy, \ y \in \left[-\frac{\pi}{2\beta}, \frac{\pi}{2\beta}\right]\right\} \cup \left\{x \pm i\frac{\pi}{2\beta}, \ x \geq \delta_\epsilon(\omega)\right\} \tag{1.60}$$

où $\delta_{-1}(\omega) \in (-\infty, E_0(\omega))$ est le réél dans (ii) Lemme 1.39 et $\delta_{+1}(\omega) := E_0(\omega) - 1$.

Proposition 1.40. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$, avec $\epsilon = \pm 1$.*
Alors la pression grand-canonique définie en (1.56) *peut encore s'écrire :*

$$P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) \tag{1.61}$$

avec, en tant qu'opérateur à trace :

$$\ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) = \frac{i}{2\pi} \int_{\gamma_\epsilon} \mathrm{d}\xi \, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1} \tag{1.62}$$

Preuve Proposition 1.40.
Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in I_\epsilon$. Soit $K \subset I_\epsilon$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. D'après le Lemme 1.39, le contour γ_ϵ introduit en (1.60) est inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{C}_\epsilon$ de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ et contourne la demi-droite $[E_0(\omega), +\infty)$. Le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir [44]) permet alors de définir au sens des opérateurs bornés :

$$\ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) = \frac{i}{2\pi} \int_{\gamma_\epsilon} \mathrm{d}\xi \, \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1} \tag{1.63}$$

L'intégrale dans (1.63) est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ en vertu du fait que $\|(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1}\|$ soit uniformément borné en $\xi \in \gamma_\epsilon$ (vu le paramétrage du contour γ_ϵ) et du fait que $|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}$ pour $\Re\xi > 0$ suffisamment grand.
Soit $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega, V))$ vérifiant $\xi_0 < E_0(\omega)$ avec $|\xi_0|$ choisi suffisamment grand. Pour tout $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega, V))$, la première équation résolvante itérée deux fois permet d'écrire :

$$\begin{aligned}(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1} = (H_\Lambda(\omega, V) - \xi_0)^{-1} + (\xi - \xi_0)(H_\Lambda(\omega, V) - \xi_0)^{-2} + \\ + (\xi - \xi_0)^2 (H_\Lambda(\omega, V) - \xi_0)^{-2}(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1}\end{aligned} \tag{1.64}$$

En insérant (1.64) dans (1.63), puis en utilisant le théorème intégral de Cauchy :

$$\ln(\mathbb{1}+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) = \frac{i}{2\pi}\left(\int_{\gamma_\epsilon} \mathrm{d}\xi \, (\xi-\xi_0)^2 \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})(H_\Lambda(\omega, V)-\xi)^{-1}\right)(H_\Lambda(\omega, V)-\xi_0)^{-2} \tag{1.65}$$

D'une part, l'intégrale entre parenthèses est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ puisque $\|(H_\Lambda(\omega, V) - \xi)^{-1}\|$ est uniformément borné en $\xi \in \gamma_\epsilon$ et pour $\Re\xi > 0$ suffisamment grand, $|(\xi - \xi_0)^2 \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})| \leq c(\beta, K, \xi_0)(\Re\xi)^2 \mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}$. D'autre part, d'après le Lemme 1.30, $(H_\Lambda(\omega, V) - \xi_0)^{-2} \in \mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$. Utilisant enfin que $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$ est un idéal bilatère, on déduit que $\ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) \in \mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$. Cet opérateur étant en plus positif et auto-adjoint d'après le théorème spectral et le calcul fonctionnel pour les fonctions d'opérateurs auto-adjoints non bornés (voir [90]), on a les identités :

$$\| \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)})\|_{\mathfrak{I}_1} = \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega, V)}) = \sum_{j=1}^{\infty} \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)})$$

■

5.2 Grandeurs caractéristiques dans l'ensemble canonique

Considérons le système $\mathfrak{S}$ constitué du gaz quantique quasi-parfait décrit dans le paragraphe 3.1 comportant un grand nombre $N \in \mathbb{N}^*$ de particules fixé. On met en contact $\mathfrak{S}$ avec un thermostat $\mathfrak{T}$ permettant ainsi des échanges libres de chaleur. On suppose que $\mathfrak{S} \cup \mathfrak{T}$ forme un système macroscopique à l'équilibre et isolé (hypothèses fondamentales pour appliquer le postulat microcanonique). Dès que $\mathfrak{S}$ a atteint son état d'équilibre, on dit qu'il se trouve dans la situation canonique.

Dans l'ensemble canonique de la mécanique statistique, soit (β, N, Λ) le jeu de paramètres extérieurs où $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ est "l'inverse" de la température T, $N \geq 1$ le nombre de particules dans $\mathfrak{S}$ et $|\Lambda|$ le volume occupé par $\mathfrak{S}$. Dans la plupart des problèmes, on préfère utiliser la densité de particules $\rho > 0$ (au lieu du nombre de particules) comme paramètre. Le nombre de particules est alors relié à la densité par $N(\Lambda) := \rho|\Lambda|$.

Toutes les informations (propriétés statistiques) concernant le système $\mathfrak{S}$ dans la situation canonique sont contenues dans la fonction de partition canonique :

Définition 1.41. *Fonction de partition canonique (voir par ex. [95])*
Pour $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho > 0$, la fonction de partition canonique est définie par :

$$Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon) := \mathrm{Tr}_{\mathfrak{h}_{N(\Lambda),\Lambda,\epsilon}} \mathrm{e}^{-\beta H_{N(\Lambda),\Lambda,\epsilon}(\omega, V)} \tag{1.66}$$

où $H_{N(\Lambda),\Lambda,\epsilon}(\omega, V)$ est la restriction à $\mathfrak{h}_{N(\Lambda),\Lambda,\epsilon}$ de l'Hamiltonien à $N(\Lambda)$ particules.

Remarque 1.42. A partir du membre de droite dans (1.51), on peut voir que la fonction de partition grand-canonique est liée aux fonctions de partition canonique par la relation :

$$\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = \sum_{N(\Lambda)=0}^{\infty} z^{N(\Lambda)} Z_\Lambda(\beta, \omega, N(\Lambda), \epsilon) \tag{1.67}$$

En particulier si $\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) < +\infty$ alors $Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon) \leq z^{-\rho|\Lambda|}\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) < +\infty$.

On définit maintenant successivement l'énergie libre de Helmholtz et les susceptibilités généralisées canonique à volume fini :

Définition 1.43. *Energie libre canonique de Helmholtz (voir par ex. [55])*
Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho > 0$. Supposons que $0 < Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon) < +\infty$.
Alors l'énergie libre canonique de Helmholtz à volume fini est définie par :

$$f_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon) := -\frac{1}{\beta} \ln\big(Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon)\big)$$

Définition 1.44. *Susceptibilités généralisées canonique à volume fini (voir [29])*
Soient $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\rho > 0$. Supposons que $\omega \mapsto f_\Lambda(\beta, \omega, \rho, \epsilon)$ soit une fonction de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un intervalle centré en ω_0.
Alors les susceptibilités généralisées canonique à volume fini sont définies par :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{M}^n_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho, \epsilon) := -\frac{1}{|\Lambda|}\frac{\partial^n f_\Lambda}{\partial B^n}(\beta, \omega_0, \rho, \epsilon) = -\frac{1}{|\Lambda|}\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n f_\Lambda}{\partial \omega^n}(\beta, \omega_0, \rho, \epsilon) \tag{1.68}$$

Remarque 1.45. Les cas $n = 1$ et $n = 2$ dans (1.68) correspondent respectivement à l'aimantation et à la susceptibilité magnétique canonique par unité de volume (voir [55]).

6 Annexe

Preuve Lemme 1.28.
Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Le noyau intégral $G_\Lambda(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,V)$ étant continu sur $\Lambda \times \Lambda$, l'estimation (1.44) se déduit de (1.43) en utilisant que :

$$\|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|_{\mathfrak{I}_1} = \int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{x}\, G_\Lambda(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,V) \leq c\beta^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{C_0\beta}\int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{x}$$

Quant à la norme $\|\cdot\|_{\mathfrak{I}_2}$, elle s'exprime à partir de $G_\Lambda(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,V)$ comme (voir [60]) :

$$\|W_\Lambda(\beta,\omega,V)\|^2_{\mathfrak{I}_2} = \int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{x}\int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{y}\,|G_\Lambda(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V)|^2$$

En vertu de l'estimation (1.43), il reste à utiliser que :

$$\operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Lambda}\int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{y}\,|G_\Lambda(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V)|^2 \leq c\beta^{-3}\mathrm{e}^{2C_0\beta}\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{2\beta}}$$

avec, par passage en coordonnées sphériques usuelles, $\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{2\beta}} = 4\pi\sqrt{\frac{\pi}{2}}\beta^{\frac{3}{2}}$.

■

Preuve Lemme 1.30.
Soit $\omega \in \mathbb{R}$. Soit $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega,V))$ tel que $\Re\xi_0 < -C_0$, voir Remarque 1.27.
A partir des estimations (1.45) et (1.44) respectivement, l'intégrale dans (1.46) est absolument convergente dans $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$ dès que $\alpha > 3/4$ et dans $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$ dès que $\alpha > 3/2$:

$$\|(H_\Lambda(\omega,V)-\xi)^{-\alpha}\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c_\alpha|\Lambda|^{\frac{1}{2}}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,t^{\alpha-\frac{7}{4}}\mathrm{e}^{(\Re\xi_0+C_0)t} \leq c'_\alpha(\Re\xi_0,C_0)|\Lambda|^{\frac{1}{2}}$$
$$\|(H_\Lambda(\omega,V)-\xi)^{-\alpha}\|_{\mathfrak{I}_1} \leq c_\alpha|\Lambda|\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,t^{\alpha-\frac{5}{2}}\mathrm{e}^{(\Re\xi_0+C_0)t} \leq c'_\alpha(\Re\xi_0,C_0)|\Lambda|$$

■

Preuve Lemme 1.39.
On utilise la détermination principale du logarithme définie par :

$$\forall\, u \in \mathbb{C}^*,\ \ \ln(u) = \ln|u| + i\mathrm{Arg}(u),\ \ \text{avec}\ \ \mathrm{Arg}(u) = 2\arctan\left(\frac{\Im u}{\Re u + |u|}\right) \in (-\pi,\pi]$$

(i). Soient $\beta > 0$ et $z \in I_{+1}$. Comme $\Im(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) = z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}\sin(\beta\Im\xi) \neq 0$ dès que $\Im\xi \in (-\pi/\beta,\pi/\beta)\setminus\{0\}$ et $\Re(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) = 1+z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}\cos(\beta\Im\xi) = 1+z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} > 0$ lorsque $\Im\xi = 0$, alors $\xi \mapsto \ln(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$ est holomorphe sur $\mathfrak{C}_{+1}$.
(ii). Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in K \subset I_{-1}(E_0(\omega))$. Soit $\alpha(\omega)$ vérifiant $-\infty < \alpha(\omega) \leq E_0(\omega)$ tel que $K \subset I_{-1}(\alpha(\omega)) \subseteq I_{-1}(E_0(\omega))$. Comme $\Im(1-z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) = -z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}\sin(\beta\Im\xi) \neq 0$ dès que $\Im\xi \in (-\pi/\beta,\pi/\beta)\setminus\{0\}$ et $\Re(1-z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) = 1-z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}\cos(\beta\Im\xi) = 1-z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \geq 1-\sup_{z\in K} z\mathrm{e}^{-\beta\alpha(\omega)} > 0$ lorsque $\Im\xi = 0$, alors $\xi \mapsto \ln(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$ est holomorphe sur $\mathfrak{C}_{-1}$.

■

Chapitre 2

Réponse magnétique à volume fini

On s'intéresse dans ce chapitre à la réponse (dia)magnétique du gaz quasi-parfait confiné de particules identiques et indiscernables (obéissant soit à la statistique de Bose-Einstein, soit à la statistique de Fermi-Dirac) décrit dans le paragraphe 3.1 du chapitre 1.

Les grandeurs caractéristiques associées au gaz à l'équilibre thermique seront principalement formulées dans l'ensemble grand-canonique de la mécanique statistique où la température T et la fugacité z sont les paramètres fixés de l'extérieur par un réservoir de (mêmes) particules et de chaleur (cf. paragraphe 5.1, chapitre 1). Le choix de ce formalisme (plutôt que celui du canonique) se justifie par le fait que les grandeurs grand-canonique s'expriment directement en fonction des valeurs propres de l'Hamiltonien à une particule.

La représentation de la pression grand-canonique à volume fini par une intégrale de Dunford-Schwartz va jouer un rôle central. Motivé par la définition des susceptibilités généralisées grand-canonique comme les dérivées partielles de la pression par rapport à l'intensité du champ magnétique B, une grande partie de notre analyse est consacrée à l'étude des propriétés de régularité de la pression en tant que fonction de B et de z.
Dans une première partie, on montre que la pression grand-canonique peut être prolongée analytiquement en B et en z jointement. Cette propriété est ensuite transférée à la fonction de partition et à la densité grand-canonique à volume fini. Dans une seconde partie, on établit une expression pour le prolongement analytique en la variable z des susceptibilités généralisées grand-canonique par la théorie des perturbations magnétiques usuelle appliquée à l'opérateur résolvante à volume fini. Ces expressions seront au centre du chapitre 4.

Ce chapitre comporte trois appendices. Dans le premier, on se sert de l'analycité de la pression grand-canonique en tant que fonction de la fugacité z pour transférer ses propriétés d'analycité en la variable B sur l'énergie libre canonique de Helmholtz. Cette opération nous permet de définir les susceptibilités généralisées dans l'ensemble canonique en vertu de la Définition 1.44. Dans le deuxième appendice, on s'intéresse aux susceptibilités généralisées grand-canonique lorsque la densité de particules devient un paramètre fixé. On montre qu'il existe une relation liant l'aimantation (resp. la susceptibilité magnétique) à densité fixée à la dérivée première (resp. seconde) par rapport à la variable B de la transformée de Legendre de la pression. Le troisième appendice est d'ordre technique uniquement.

Dans tout ce chapitre, les hypothèses concernant le domaine de confinement Λ du gaz, le potentiel vecteur magnétique $\mathbf{a}$ et le potentiel électrique V sont celles du paragraphe 3.1, chapitre 1. On supprime désormais la dépendance explicite en "V" dans les notations. On introduit systématiquement le paramètre $\epsilon = \pm 1$ dans les notations ; on rappelle que $\epsilon = -1$ fait référence au gaz de bosons et $\epsilon = +1$ au gaz de fermions.

1 Résultats principaux

Dans le formalisme grand-canonique de la mécanique statistique quantique, soit $(\beta, z, |\Lambda|)$ le jeu de paramètres extérieurs où $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ est "l'inverse" de la température T (k_B désigne la constante de Boltzmann), $z := \mathrm{e}^{\beta\mu}$ est la fugacité (μ désigne le potentiel chimique) et $|\Lambda|$ est le volume du domaine de confinement du gaz.

Pour $\omega_0 \in \mathbb{R}$, introduisons les domaines du plan complexe définis par :

$$\mathcal{D}_{-1}(E_0(\omega_0)) := \mathbb{C} \setminus [\mathrm{e}^{\beta E_0(\omega_0)}, +\infty) \quad \text{et} \quad \mathcal{D}_{+1}(E_0(\omega_0)) := \mathbb{C} \setminus (-\infty, -\mathrm{e}^{\beta E_0(\omega_0)}] \tag{2.1}$$

$$\mathcal{D}_\epsilon := \bigcap_{\omega_0 \in \mathbb{R}} \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0)) = \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0)), \quad E_0(\omega_0) := \inf \sigma(H_\infty(\omega_0)) \tag{2.2}$$

Le premier résultat principal de ce chapitre établit que la pression grand-canonique à volume fini initialement définie en (1.61), peut être prolongé analytiquement[1] en la fugacité z et en l'intensité du champ magnétique B jointement :

Théorème 2.1. *Soit $\beta > 0$. Alors pour chaque ensemble ouvert et borné $\mathcal{K}$ tel que $\overline{\mathcal{K}} \subset \mathcal{D}_\epsilon$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que la pression grand-canonique à volume fini $P_\Lambda(\beta, \cdot, \cdot, \epsilon)$ soit jointement analytique en (ω, z) sur $\mathcal{N}_\Lambda \times \mathcal{K}$.*

Le second résultat principal donne une expression du prolongement analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ des susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini (voir Définition 1.34) ; l'existence des susceptibilités généralisées étant assurée par le Théorème 2.1.

Introduisons les notations nécessaires à la formulation du Théorème 2.2.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un compact tel que $z \in K$. Par le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz, le prolongement analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ de la pression grand-canonique à volume fini est défini par (voir page 45) :

$$\begin{aligned} P_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) :&= \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}) \\ &= \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \frac{i}{2\pi} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \left\{ \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi \, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \right\} \end{aligned} \tag{2.3}$$

avec Γ_K un contour du type (2.14), inclus dans le domaine d'holomorphie de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$ $\forall\, z \in K$ (cf. Lemme 2.6), contournant la demi-droite $[E_0(\omega_0), +\infty)$.

A partir de l'intégrale de Dunford-Schwartz en (2.3), on utilise la théorie des perturbations magnétiques usuelle (au sens des opérateurs) appliquée à la résolvante à volume fini. Soient $s_{1,\Lambda}(\omega_0)$ et $s_{2,\Lambda}$ les opérateurs définis en (1.25). Pour $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$, soient $S_{i,\Lambda}(\omega_0, \xi)$, $i \in \{1, 2\}$, les opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$ (voir section 3) définis par :

$$S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) := s_{1,\Lambda}(\omega_0)(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} = \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x}))(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \tag{2.4}$$

$$S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi) := s_{2,\Lambda}(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} = \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \tag{2.5}$$

Pour tout couple $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$, posons $\delta\omega = \omega - \omega_0$ et introduisons :

$$S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi) := (H_\Lambda(\omega) - H_\Lambda(\omega_0))(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} = \delta\omega S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) + (\delta\omega)^2 S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi) \tag{2.6}$$

[1] Par souci de lisibilité, on utilisera généralement la même notation pour désigner une grandeur grand-canonique et son prolongement analytique par rapport à la variable z ou/et la variable ω.

Pour $k \in \mathbb{N}^*$ et $(i_1, \dots, i_k) \in \{1,2\}^k$, introduisons la famille d'opérateurs dans $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$:

$$J_{k,\Lambda}(i_1, \dots, i_k)(\omega_0, \xi) := (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \prod_{m=1}^{k} S_{i_m,\Lambda}(\omega_0, \xi) \tag{2.7}$$

Pour tout entier $n \geq k \geq 1$, soit $\chi_k^n(i_1, \dots, i_k)$ la fonction caractéristique définie par :

$$\chi_k^n(i_1, \dots, i_k) := \begin{cases} 1 & \text{si } i_1 + \cdots + i_k = n \\ 0 & \textit{sinon} \end{cases} \tag{2.8}$$

Voici le second résultat principal de ce chapitre :

Théorème 2.2. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, $\epsilon = \pm 1$, un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Alors pour tout entier $n \geq 1$, on a :*

$$\mathcal{X}_\Lambda^n(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\right) \tag{2.9}$$

avec, en tant qu'opérateur à trace :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\right) &= \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \\ &= n! \frac{i}{2\pi} \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1, \dots, i_k) \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) J_{k,\Lambda}(i_1, \dots, i_k)(\omega_0, \xi) \end{aligned} \tag{2.10}$$

En particulier, dans le cas de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique[2] grand canonique à volume fini :

$$\mathcal{X}_\Lambda^1(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|} \frac{i}{2\pi} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \left\{ \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) \right\} \tag{2.11}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_\Lambda^2(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{2\epsilon}{\beta|\Lambda|} \frac{i}{2\pi} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \Bigg\{ \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \cdot \\ \cdot \{S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) - S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi)\} \Bigg\} \end{aligned} \tag{2.12}$$

Remarque 2.3. Les domaines de définition de z ont été choisis ici indépendants de Λ pour les besoins du chapitre 5. Mais les résultats énoncés restent encore valables lorsque ces domaines sont étendus à $\mathcal{D}_\epsilon(e_1(\omega_0)) \supset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ avec $e_1(\omega_0) := \inf \sigma(H_\Lambda(\omega_0))$.

Remarque 2.4. Comme indiqué dans l'énoncé du Théorème 2.1, le voisinage complexe de l'axe des réels $\mathcal{N}$ dépend du domaine de confinement Λ. En l'occurrence si Λ_1 et Λ_2 sont deux ouverts bornés simplement connexe tels que $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$, alors $\mathcal{N}_{\Lambda_2} \subset \mathcal{N}_{\Lambda_1}$.

2 Propriétés de la pression grand-canonique à volume fini

On commence par étudier séparément l'analycité de la pression grand-canonique à volume fini en la variable z (paragraphe 2.1) puis en la variable ω (paragraphe 2.2). Basé sur le "théorème d'holomorphie séparée" d'Hartog (voir par ex. [54]), on prouve dans le paragraphe 2.3 le Théorème 2.1. Enfin, on transfert cette propriété d'analycité jointe à la fonction de partition et à la densité grand-canonique à volume fini (paragraphe 2.5).

[2] Il s'agit ici de la contribution liée aux moments magnétiques orbitaux des particules du gaz confiné.

2.1 Analycité en la fugacité z

A partir de (1.61) avec $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$ fixés, on construit ici une expression du prolongement analytique de $P_\Lambda(\beta, \omega_0, \cdot\,, \epsilon)$ sur le domaine $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ défini en (2.1).

Proposition 2.5. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Alors la pression grand-canonique à volume fini $P_\Lambda(\beta, \omega_0, \cdot\,, \epsilon)$ est analytique en z sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$.*

La preuve de ce résultat nécessite les 2 lemmes suivants (leur preuve figure en annexe) :

Lemme 2.6. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\alpha(\omega_0)$ un réél vérifiant $-\infty < \alpha(\omega_0) \leq E_0(\omega_0)$. Alors pour chaque sous-ensemble compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0)) \subseteq \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un réél $\xi_K > E_0(\omega_0)$ satisfaisant la condition $\sup_{z\in K} |z| \mathrm{e}^{-\beta \Re \xi} < 1$ pour $\Re\xi \geq \xi_K$, et il existe un autre réél $\eta_K > 0$ tels que la fonction $(z, \xi) \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln\big(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}\big)$ soit jointement analytique sur $K \times \mathfrak{D}$, où $\mathfrak{D}$ désigne le domaine du plan complexe :*

$$\mathfrak{D} := \Big\{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Im\xi \in \Big(-\frac{\eta_K}{\beta}, \frac{\eta_K}{\beta}\Big),\ \Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K)\Big\} \cup \Big\{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Re\xi \geq \xi_K\Big\} \tag{2.13}$$

De plus si K' désigne un sous-ensemble compact tel que $K' \subset K$, alors $\eta_{K'} > \eta_K$.

Lemme 2.7. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\alpha(\omega_0)$ un réél vérifiant $-\infty < \alpha(\omega_0) < E_0(\omega_0)$. Soient $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0))$ un compact et $\eta_K > 0$, $\xi_K > E_0(\omega_0)$ les réels du Lemme 2.6. Avec $\varsigma \in \big[0, \frac{\pi}{2}\big)$, soit Γ_K le contour orienté positivement, inclus dans $\mathfrak{D}$, défini par :*

$$\Gamma_K := \Big\{\Re\xi = \alpha(\omega_0),\ \Im\xi \in \Big[-\frac{\eta_K}{2\beta}, \frac{\eta_K}{2\beta}\Big]\Big\} \cup \Big\{\Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K),\ \Im\xi = \pm\frac{\eta_K}{2\beta}\Big\} \cup$$
$$\cup \Big\{\Re\xi \geq \xi_K,\ \arg\Big(\xi - \xi_K \mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\Big) = \pm\varsigma\Big\} \tag{2.14}$$

Alors pour tout $z \in K$, la fonction $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$ est exponentiellement décroissante sur le contour Γ_K, i.e. il existe une constante $c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\forall\, z \in K,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \tag{2.15}$$

Et pour tout polynôme $p(|\xi|)$, il existe une autre constante $c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\forall\, z \in K, \quad \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |p(|\xi|)||\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K) < +\infty \tag{2.16}$$

Preuve Proposition 2.5.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Pour $n \in \mathbb{N}^*$, soit $\alpha_n(\omega_0)$ défini par $\alpha_n(\omega_0) := E_0(\omega_0) - \frac{1}{n}$.
Soit $K_0 \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha_n(\omega_0))$ un compact tel que $K_0 \cap \mathbb{R}_+^*$ contienne un intervalle ouvert non-vide.
On commence par construire le prolongement analytique de $P_\Lambda(\beta, \omega_0, \cdot\,, \epsilon)$ sur K_0.
Soit Γ_{K_0} le contour orienté positivement (voir (2.14) avec $\varsigma = 0$) :

$$\Gamma_{K_0} = \Big\{\Re\xi \in [\alpha_n(\omega_0), +\infty),\ \Im\xi = \pm\frac{\eta_K}{2\beta}\Big\} \cup \Big\{\Re\xi = \alpha_n(\omega_0),\ \Im\xi \in \Big[-\frac{\eta_K}{2\beta}, \frac{\eta_K}{2\beta}\Big]\Big\}$$

avec $\eta_K > 0$ le réél du Lemme 2.6. Ainsi construit, Γ_{K_0} est inclus dans le domaine d'holomorphie de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$ et contourne la demi-droite $[E_0(\omega_0), +\infty)$. Le calcul fonctionnel de Dunford (voir [44]) permet alors d'écrire au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$:

$$\forall\, z \in K_0, \quad \ln\big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\big) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_{K_0}} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1}$$

Soit $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$ tel que $\xi_0 < E_0(\omega_0)$ et $|\xi_0|$ choisi assez grand. Par la première équation résolvante itérée deux fois suivi du théorème intégral de Cauchy, pour tout $z \in K_0$:

$$\ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\right) = \left(\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_{K_0}} \mathrm{d}\xi\, (\xi-\xi_0)^2 \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}\right)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2} \tag{2.17}$$

Puisque la trace d'une fonction à valeurs opérateurs $\mathfrak{I}_1$-analytique sur un ouvert $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$ est analytique sur $\mathcal{U}$, il suffit de prouver que $K_0 \ni z \mapsto \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)})$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. D'une part, $K_0 \ni z \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est holomorphe. D'autre part, de par le choix de Γ_{K_0}, l'opérateur $(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}$ est borné uniformément en $\xi \in \Gamma_{K_0}$ (et ω_0) et $\Gamma_{K_0} \ni \xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est exponentiellement décroissante (cf. Lemme 2.7). Le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale assure alors que la fonction à valeurs opérateurs :

$$K_0 \ni z \mapsto I_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_{K_0}} \mathrm{d}\xi\, (\xi-\xi_0)^2 \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}$$

est $\mathfrak{B}$-analytique (i.e. analytique au sens de la topologie $\|\cdot\|$).
Comme $\xi \mapsto \partial_z \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est holomorphe sur le même domaine que $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot)$, posons :

$$\frac{\partial I_\Lambda}{\partial z}(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_{K_0}} \mathrm{d}\xi\, (\xi-\xi_0)^2 \left(\frac{\epsilon \mathrm{e}^{-\beta\xi}}{1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}}\right)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}$$

Utilisant que $(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2}$ est un opérateur à trace (cf. Lemme 1.30), on a :

$$\begin{aligned}
&\lim_{h\to 0}\left\|\frac{I_\Lambda(\beta,\omega_0,z+h,\epsilon)-I_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)}{h}(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2} - \frac{\partial I_\Lambda}{\partial z}(\beta,\omega_0,z,\epsilon)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2}\right\|_{\mathfrak{I}_1} \\
&\leq \lim_{h\to 0}\left\|\frac{I_\Lambda(\beta,\omega_0,z+h,\epsilon)-I_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)}{h} - \frac{\partial I_\Lambda}{\partial z}(\beta,\omega_0,z,\epsilon)\right\| \left\|(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2}\right\|_{\mathfrak{I}_1} = 0
\end{aligned}$$

ce qui garantit que $K_0 \ni z \mapsto \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}) = I_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)(H_\Lambda(\omega_0)-\xi_0)^{-2}$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. Il s'ensuit l'analycité sur K_0 de :

$$z \mapsto \hat{P}_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda|}\mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\right) \tag{2.18}$$

Puisque $\hat{P}_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ coïncide avec $P_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ pour tout $z \in K_0 \cap \mathbb{R}_+^*$, (2.18) n'est autre que le prolongement analytique de $P_\Lambda(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ sur K_0. Il reste maintenant à étendre ce résultat sur tout le domaine $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$. Pour cela, considérons une suite croissante (au sens de l'inclusion) de compacts $\{K_l\}_{l\in\mathbb{N}}$, avec K_0 choisi comme ci-dessus, tel que $\cup_{l\in\mathbb{N}} K_l = \mathcal{D}_\epsilon(\alpha_n(\omega_0))$. En vertu du Lemme 2.6, les extensions analytiques de $\hat{P}_\Lambda(\beta,\omega_0,\cdot,\epsilon)$ définies en (2.18) correspondant respectivement aux compacts K_l et $K_{l'}$, avec $K_l \subset K_{l'}$, coïncident sur K_l. Il suffit pour finir d'utiliser que $\cup_{n\in\mathbb{N}^*}\mathcal{D}_\epsilon(\alpha_n(\omega_0)) = \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$.

■

2.2 Analycité en l'intensité du champ magnétique B

Dans ce paragraphe, on démontre le résultat d'analycité locale suivant :

Proposition 2.8. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un compact, $\epsilon = \pm 1$. Alors il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}_{\Lambda,K}(\omega_0)$ de ω_0 tel que $\forall\, z \in K$, la pression grand-canonique à volume fini $P_\Lambda(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)$ soit analytique en ω sur $\mathcal{V}_{\Lambda,K}(\omega_0)$.*

Ce théorème admet un corollaire (immédiat) concernant l'analycité globale de la pression grand-canonique à volume fini sur un voisinage complexe de l'axe réél (dépendant du compact K). Mais dans ce cas, K doit être pris dans l'intersection $\cap_{\omega_0 \in \mathbb{R}} \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, c'est-à-dire dans $\mathcal{D}_\epsilon$, voir (2.2).

Corollaire 2.9. *Soient $\beta > 0$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ un compact. Alors il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_{\Lambda,K}$ de l'axe réél tel que pour tout $z \in K$, la pression grand-canonique à volume fini $P_\Lambda(\beta, \cdot\,, \omega, \epsilon)$ soit analytique en ω sur $\mathcal{N}_{\Lambda,K}$.*

Preuve Corollaire 2.9.
Il suffit simplement à partir de la Proposition 2.8 de poser $\mathcal{N}_{\Lambda,K} := \bigcup_{\omega_0 \in \mathbb{R}} \mathcal{V}_{\Lambda,K}(\omega_0)$.

■

Le reste de ce paragraphe est consacré à la preuve de la Proposition 2.8. Il est à noter que la démonstration n'utilisera pas la représentation en série (1.56) de la pression grand-canonique puisque les propriétés d'analycité des niveaux d'énergie $e_j(\omega)$, $j \geq 1$, sont difficiles à obtenir et ne semblent pas être connues sous les hypothèses considérées ici.

La preuve de la Proposition 2.8 est basée sur la Proposition 2.10 ci-dessous.
Dans l'appendice 3 de ce chapitre, on donne une autre preuve de la Proposition 2.10 bien plus technique reposant sur l'utilisation du semi-groupe.

Proposition 2.10. *Soient $\hat{\omega} \in \mathbb{C}$ et $\xi \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$. Alors il existe un voisinage $\mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que la fonction à valeurs opérateurs $\mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ soit $\mathfrak{I}_2$-analytique.*

On a besoin pour cela du lemme suivant dont la preuve figure en annexe :

Lemme 2.11. *Soient $\{A(u),\ u \in \mathcal{U}\}$ et $\{B(u),\ u \in \mathcal{U}\}$ deux familles d'opérateurs bornés définies sur un ouvert $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$. Soient $U, V \subset \mathcal{U}$ des ouverts et $j \in \{1, 2\}$.*
(i). Supposons que $U \ni u \mapsto A(u)$ soit $\mathfrak{B}$-analytique et $V \ni u \mapsto B(u)$ $\mathfrak{I}_j$-analytique. Alors $u \mapsto A(u)B(u)$ est $\mathfrak{I}_j$-analytique sur $U \cap V$.
(ii). Supposons que $U \ni u \mapsto A(u)$ et $V \ni u \mapsto B(u)$ soient $\mathfrak{I}_2$-analytique. Alors $u \mapsto A(u)B(u)$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique sur $U \cap V$.

Notons que (i) repose simplement sur le fait que $\mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$, $j \in \{1, 2\}$, est un idéal bilatère, i.e. si $A \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$ et $B \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ alors $AB \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$. (ii) repose sur le fait qu'un produit de deux opérateurs de Hilbert-Schmidt est un opérateur à trace.

Preuve Proposition 2.10
Soient $\hat{\omega} \in \mathbb{C}$ et $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$. Ceci est toujours possible puisque l'opérateur $H_\Lambda(\hat{\omega})$ est m-sectoriel (cf. Lemme 1.23). On choisit $\xi_0 < \gamma_{\delta_0}(\hat{\omega})$, avec $\gamma_{\delta_0}(\hat{\omega})$ le vertex (1.36) du secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\hat{\omega})$ (1.34), et $|\xi_0|$ suffisamment grand. On montre d'abord l'existence d'un voisinage $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ sur lequel $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique. Puis on étend cette propriété pour tout $\xi \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$ par l'intermédiaire de la première équation résolvante.
En utilisant l'opérateur $s_\Lambda(\hat{\omega}, \omega_0 = 0)$ défini en (1.26), on a sur $D(H_\Lambda(0)) \subset \mathcal{Q}(H_\Lambda(0))$:

$$H_\Lambda(\hat{\omega}) - \xi_0 = (H_\Lambda(0) - \xi_0) + s_\Lambda(\hat{\omega}, 0) = \{\mathbb{1} + U_\Lambda(\hat{\omega}, \xi_0)\}(H_\Lambda(0) - \xi_0) \tag{2.19}$$

avec $U_\Lambda(\hat{\omega},\xi_0) := s_\Lambda(\hat{\omega},0)(H_\Lambda(0)-\xi_0)^{-1} \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$, conséquence du fait que $s_\Lambda(\hat{\omega},0)$ est $H_\Lambda(0)$-borné avec borne relative nulle (cf. preuve Lemme 1.19). Compte-tenu de (2.19), l'opérateur $\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\hat{\omega},\xi_0)\}$ est inversible d'inverse :

$$\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\hat{\omega},\xi_0)\}^{-1} = (H_\Lambda(0)-\xi_0)(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1} = \mathbb{1} - s_\Lambda(\hat{\omega},0)(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1}$$

et $\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\hat{\omega},\xi_0)\}^{-1} \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ car $s_\Lambda(\hat{\omega},0)$ est $H_\Lambda(\hat{\omega})$-borné avec borne relative nulle. Comme $\{H_\Lambda(\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est une famille analytique de type (A), il existe un voisinage $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que $\forall\,\omega\in\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$, l'identité (2.19) soit encore valable. Par suite :

$$\forall\,\omega\in\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}),\quad (H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1} = (H_\Lambda(0)-\xi_0)^{-1}\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\omega,\xi_0)\}^{-1} \tag{2.20}$$

Montrons maintenant que $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique. Posons :

$$\forall\,\omega\in\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}),\quad U'_\Lambda(\omega,\xi_0) := \big(\mathbf{a}(\mathbf{x})\cdot(i\nabla)+\omega\mathbf{a}^2(\mathbf{x})\big)(H_\Lambda(0)-\xi_0)^{-1}$$

Soit $\omega\in\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$. Via la définition des opérateurs $s_{1,\Lambda}(0)$ et $s_{2,\Lambda}$ en (1.25), il vient :

$$\lim_{h\to 0}\left\|\frac{U_\Lambda(\omega+h,\xi_0)-U_\Lambda(\omega,\xi_0)}{h} - U'_\Lambda(\omega,\xi_0)\right\| \le \lim_{h\to 0}|h|a_\infty^2\|(H_\Lambda(0)-\xi_0)^{-1}\| = 0$$

ce qui assure que $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto U_\Lambda(\omega,\xi_0)$, et par suite $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto \{\mathbb{1}+U_\Lambda(\omega,\xi_0)\}^{-1}$, soient $\mathfrak{B}$-analytique. Utilisant cette dernière propriété puis que $\|(H_\Lambda(0)-\xi_0)^{-1}\|_{\mathfrak{I}_2} \le c(\Lambda)$ d'après (1.49) ; on obtient à partir de (2.20) que pour tout $\omega\in\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$:

$$\begin{aligned}
&\lim_{h\to 0}\left\|\frac{(H_\Lambda(\omega+h)-\xi_0)^{-1}-(H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}}{h} - \frac{d}{d\omega}(H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}\right\|_{\mathfrak{I}_2}\\
&\le c(\Lambda)\lim_{h\to 0}\left\|\frac{\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\omega+h,\xi_0)\}^{-1}-\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\omega,\xi_0)\}^{-1}}{h} - \frac{d}{d\omega}\{\mathbb{1}+U_\Lambda(\omega,\xi_0)\}^{-1}\right\| = 0
\end{aligned}$$

ce qui garantit que $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique.
Reste à étendre ce résultat pour $\xi\in\rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$ quelconque. La première équation résolvante donne au sens des opérateurs bornés :

$$(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi)^{-1} = (H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1} + (\xi-\xi_0)(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi)^{-1}(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1}$$

Comme il existe un voisinage $V_\xi(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que $V_\xi(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto \big(H_\Lambda(\omega)-\xi\big)^{-1}$ soit $\mathfrak{B}$-analytique, en utilisant (i) du Lemme 2.11, on déduit que la fonction à valeurs opérateurs $\omega\mapsto(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}(H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique sur $\mathcal{V}_\xi(\hat{\omega}) := \nu_{\xi_0}(\hat{\omega})\cap V_\xi(\hat{\omega})$.
Finalement $\mathcal{V}_\xi(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto \big(H_\Lambda(\omega)-\xi\big)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique.

■

Corollaire 2.12. *Soient $\hat{\omega}\in\mathbb{C}$ et $\xi\in\rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$. Alors il existe un voisinage $\mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que la fonction à valeurs opérateurs $\mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-2}$ soit $\mathfrak{I}_1$-analytique.*

Preuve Corollaire 2.12.
Etant donné le résultat de la Proposition 2.10, il suffit d'appliquer (ii) du Lemme 2.11.

■

Preuve Proposition 2.8.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, avec K un sous-ensemble compact.
Soit $\alpha(\omega_0)$ vérifiant $-\infty < \alpha(\omega_0) < E_0(\omega_0)$ et tel que $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0))$. Avec $\eta_K > 0$ et $\xi_K > E_0(\omega_0)$ les réels du Lemme 2.6, soit Γ_K (cf. (2.14) avec $\varsigma = \pi/3$) le contour :

$$\Gamma_K = \Big\{\Re\xi = \alpha(\omega_0),\ \Im\xi \in \Big[-\frac{\eta_K}{2\beta}, \frac{\eta_K}{2\beta}\Big]\Big\} \cup \Big\{\Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K),\ \Im\xi = \pm\frac{\eta_K}{2\beta}\Big\} \cup$$
$$\cup \Big\{\Re\xi \geq \xi_K,\ \arg\Big(\xi - \xi_K \mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\Big) = \pm\frac{\pi}{3}\Big\} \quad (2.21)$$

Ainsi construit, le contour Γ_K est inclus dans le domaine d'holomorphie de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$ et contourne la demi-droite $[E_0(\omega_0), +\infty)$. Pour $\omega' \in \mathbb{C}$, soit $\theta_{\delta_0}(\omega')$ le demi-angle (1.35) du secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega')$, voir (1.34) avec la Remarque 1.24. En utilisant successivement les inégalités (1.31) et (1.33) puis (1.35), soient $r_{\omega_0,j} > 0$ avec $j \in \{1, 2, 3\}$, des réels satisfaisant :

$$a_\infty^2 r_{\omega_0,1}^2 = E_0(\omega_0) - \alpha(\omega_0) > 0 \quad (2.22)$$

$$c r_{\omega_0,2} a_\infty \sqrt{(\xi_K + 1) + c' + \frac{r_{\omega_0,2}^2}{2} a_\infty^2} \leq \frac{\eta_K}{3\beta} \quad (2.23)$$

$$\frac{\pi}{4} \geq |\theta_{\delta_0}(\omega_0 \pm i r_{\omega_0,3})| \quad \Longrightarrow \quad 1 > c r_{\omega_0,3} a_\infty \frac{\sqrt{E_0(\omega_0) + \delta_0 + c'}}{\delta_0} \quad (2.24)$$

Posons $r_{\omega_0} := \min\{r_{\omega_0,1}, r_{\omega_0,2}, r_{\omega_0,3}\} > 0$ et notons $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$ le disque ouvert centré en ω_0 et de rayon r_{ω_0}. Avec ce choix de r_{ω_0}, $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, le spectre de l'opérateur $H_\Lambda(\omega)$ (inclus dans la parabole "grisée" ci-dessous, cf. (1.33)) se trouve à l'intérieur de Γ_K.

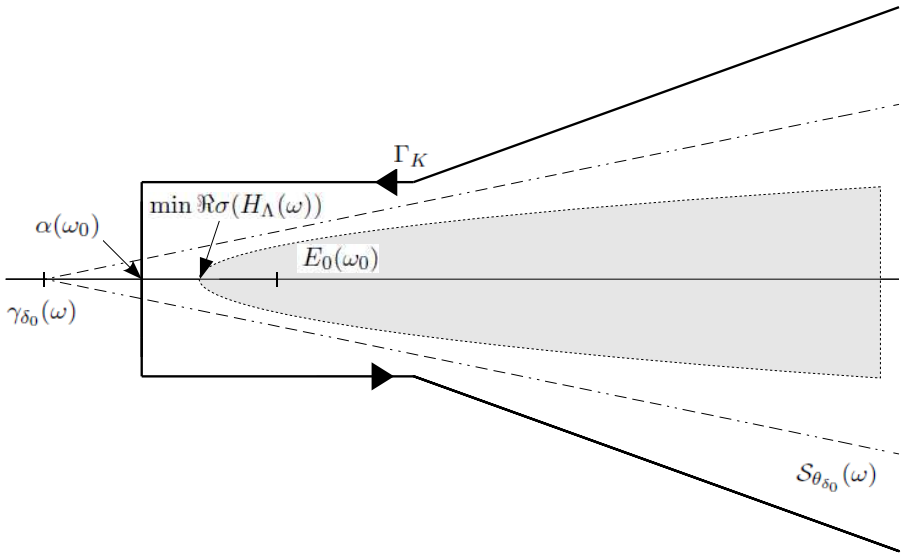

FIG. 2.1 – La figure ci-dessus représente la configuration obtenue pour un $\omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$.

En effet pour tout $\omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, $\alpha(\omega_0) < \min \Re\sigma(H_\Lambda(\omega))$ (d'après (2.22)) et lorsque $\Re\sigma(H_\Lambda(\omega)) \leq \xi_K + 1$ alors $\max |\Im\sigma(H_\Lambda(\omega))| \leq \frac{\eta_K}{3\beta}$ (d'après (2.23)). Enfin, pour tout $\Re\xi \geq \xi_K + 1$, le secteur $\mathcal{S}_{\theta_{\delta_0}}(\omega)$ se trouve à l'intérieur du contour Γ_K (d'après (2.24)).

Le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir [44]) permet de définir :

$$\forall\, z \in K,\ \forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0}), \quad L(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1} \quad (2.25)$$

L'intégrale dans (2.25) est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ en vertu de la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ sur Γ_K et le fait que $\forall \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, $\|(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}\|$ est uniformément borné en ω (et même en $\xi \in \Gamma_K$). Cela est évident pour tout $\xi \in \Gamma_K$ tel que $\Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K + 1]$ vu le paramétrage du contour. Et pour tout $\xi \in \Gamma_K$ tel que $\Re\xi \geq \xi_K + 1$, un simple argument géométrique permet d'obtenir :

$$\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0}), \quad \|(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}\| \leq \frac{c}{\left|\xi - \xi_K \mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\right|}, \quad c > 0$$

Comme pour chaque $\xi \in \Gamma_K$, la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est $\mathfrak{B}$-analytique sur $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale assure que pour tout $z \in K$, la famille d'opérateurs $\{L(\beta, \omega, z, \epsilon),\ \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})\}$ est $\mathfrak{B}$-analytique. Et puisque pour tout $\omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0}) \cap \mathbb{R}$, $L(\beta, \omega, z, \epsilon)$ coïncide avec $\ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right)$, alors la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto L(\beta, \omega, z, \epsilon)$ n'est autre que le prolongement analytique (au sens de la topologie $\|\cdot\|$) de $\ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\cdot)}\right)$ sur le disque $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$.

Montrons maintenant que $D_K(\omega_0, r_{\omega_0}) \ni \omega \mapsto \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right)$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. Soit $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$ satisfaisant $\xi_0 < \gamma_{\delta_0}(\omega_0 \pm i r_{\omega_0})$ avec $|\xi_0|$ choisi suffisamment grand et tel que $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega))$. Par la première équation résolvante itérée deux fois suivi du théorème intégral de Cauchy : $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$ et $\forall\, z \in K$,

$$\ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right) = \left(\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, (\xi - \xi_0)^2 \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}\right)(H_\Lambda(\omega) - \xi_0)^{-2}$$

Par les mêmes arguments que ci-dessus, pour tout $z \in K$, la famille d'opérateurs entre parenthèses est une famille d'opérateurs $\mathfrak{B}$-analytique en ω dans $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$. Aussi d'après le Corollaire 2.12, il existe un voisinage $\nu(\omega_0)$ de ω_0 tel que la fonction à valeurs opérateurs $\nu(\omega_0) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi_0)^{-2}$ soit $\mathfrak{I}_1$-analytique. Il ne reste plus qu'à utiliser (ii) Lemme 2.11 qui donne finalement que pour tout $z \in K$, la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right)$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique sur $\mathcal{V}_K(\omega_0) := \nu(\omega_0) \cap D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$; et par suite $\omega \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est analytique sur ce même domaine.

■

Remarque 2.13. La démonstration de la Proposition 2.8 permet de mettre en évidence :
(i). Le voisinage $\mathcal{V}_K(\omega_0)$ est d'autant plus "petit" que $|\omega_0|$ est grand. Cela vient de (2.24) où apparaît $E_0(\omega_0)$ sachant (1.30). Dans la limite $|\omega_0| \to \infty$, $\mathcal{V}_K(\omega_0)$ se réduit à un point.
(ii). Le voisinage $\mathcal{V}_K(\omega_0)$ dépend implicitement du domaine Λ. Ceci est une conséquence de (2.22), (2.23) et (2.24) : plus la quantité $a_\infty := \sup_{\mathbf{x} \in \Lambda} |\mathbf{a}(\mathbf{x})|$ est grande plus r_{ω_0} doit être choisi petit. Dans la limite $|\Lambda| \to \infty$, on a alors $r_{\omega_0} \to 0$.

2.3 Analycité jointe en la fugacité et en l'intensité du champ magnétique

Ce paragraphe est consacré à la preuve du Théorème 2.1 basée sur le "théorème d'holomorphie séparée" d'Hartog (voir par ex. [54] pour un énoncé détaillé) :

Théorème 2.14. *Théorème d'Hartog*
Soit f une fonction à valeurs complexes définie sur un ensemble ouvert $U \subset \mathbb{C}^n$. Supposons que f soit analytique en chaque variable z_j lorsque les autres variables z_k pour $k \neq j$ sont fixées. Alors f est analytique en ses n variables.

Il suffit maintenant d'appliquer directement le Théorème 2.14 ci-dessus compte-tenu du Corollaire 2.9 et de l'extension de la Proposition 2.5 ci-dessous :

Proposition 2.15. *Soient $\beta > 0$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ un sous-ensemble compact, $\epsilon = \pm 1$. Alors il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_{K,\Lambda}$ de l'axe réel tel que $\forall\, \omega \in \mathcal{N}_{\Lambda,K}$, la pression grand-canonique à volume fini $P_\Lambda(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ soit analytique en z sur K.*

Preuve Proposition 2.15.
Soient $\beta > 0$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ un compact. Soit α un réél satisfaisant $-\infty < \alpha < E_0(0)$ et tel que $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha)$. Avec $\eta_K > 0$ et $\xi_K > E_0(0)$ les réels du Lemme 2.6, soit Γ_K (cf. (2.14) avec $\varsigma = \pi/3$) le contour orienté positivement défini par :

$$\Gamma_K = \Big\{\Re\xi = \alpha,\ \Im\xi \in \Big[-\frac{\eta_K}{2\beta}, \frac{\eta_K}{2\beta}\Big]\Big\} \cup \Big\{\Re\xi \in [\alpha, \xi_K),\ \Im\xi = \pm\frac{\eta_K}{2\beta}\Big\} \cup$$
$$\cup \Big\{\Re\xi \geq \xi_K,\ \arg\Big(\xi - \xi_K \mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\Big) = \pm\frac{\pi}{3}\Big\}$$

Soient $\hat{r}_1 > 0$ un réél vérifiant $a_\infty^2 \hat{r}_1^2 := E_0(0) - \alpha$ et $\hat{\Omega} := \big\{\omega_0 \in \mathbb{R} \,:\, E_0(\omega_0) - a_\infty^2 \hat{r}_1^2 \leq \xi_K + 1\big\}$. Soient $\hat{r}_2 := \min_{\omega_0 \in \hat{\Omega}} r_{\omega_0,2} > 0$ avec $r_{\omega_0,2} > 0$ défini en (2.23) et pour chaque $\omega_0 \in \mathbb{R}$, soit $r_{\omega_0,3} > 0$ défini en (2.24). Posons $\hat{r}_{\omega_0} := \min\{\hat{r}_1, \hat{r}_2, r_{\omega_0,3}\} > 0$ et désignons par $D_K(\omega_0, \hat{r}_{\omega_0})$ le disque ouvert centré en ω_0 et de rayon $\hat{r}_{\omega_0}$. Considérons maintenant $\mathcal{N}_K := \cup_{\omega_0 \in \mathbb{R}} D_K(\omega_0, \hat{r}_{\omega_0})$. Alors pour tout $\omega \in \mathcal{N}_K$, le spectre de $H_\Lambda(\omega)$ est à l'intérieur de Γ_K et $\forall\, \xi \in \Gamma_K$ tel que $\Re\xi \geq \xi_K + 1$, le secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega)$ se trouve à l'intérieur de Γ_K.
Le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir [44]) permet de définir dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$:

$$\forall\, \omega \in \mathcal{N}_K,\ \forall\, z \in K, \quad \ln\big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\big) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$$

Reste à prouver que $\forall\, \omega \in \mathcal{N}_K$, la famille $\{\ln\big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\big),\ z \in K\}$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. Soient $\omega \in \mathcal{N}_K$ et $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega))$ tel que $\xi_0 < \gamma_{\delta_0}(0 \pm i\hat{r}_1)$ avec $|\xi_0|$ choisi assez grand. Par la première équation résolvante itérée deux fois suivi du théorème intégral de Cauchy :

$$\forall\, z \in K,\ \ln\big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\big) = \Big(\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, (\xi - \xi_0)^2 \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}\Big)(H_\Lambda(\omega) - \xi_0)^{-2}$$

On finit la preuve en utilisant les mêmes arguments que ceux menant à (2.18) sachant que $(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est uniformément borné en $\xi \in \Gamma_K$ et $\omega \in \mathcal{N}_K$ (cf. preuve Proposition 2.8).

■

Remarque 2.16. *Preuve alternative du Théorème 2.1 sans utiliser le théorème d'Hartog.*
Etant donné les résultats du Corollaire 2.9 et de la Proposition 2.15, et compte-tenu du fait que $\partial_{\overline{z}} P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon) = 0 = \partial_{\overline{\omega}} P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$, il suffit de montrer en plus que $\mathcal{N}_\Lambda \times K \ni (\omega, z) \mapsto \partial_z P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ et $\mathcal{N}_\Lambda \times K \ni (\omega, z) \mapsto \partial_\omega P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ sont continues (voir [12]) ; ce qu'on peut obtenir à peu de frais.

2.4 Convexité en la variable μ

On établit ici un résultat qui nous sera utile dans l'appendice 1 du chapitre 5.

Proposition 2.17. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $J_{-1} = J_{-1}(\omega_0) := (-\infty, E_0(\omega_0))$ et $J_{+1} := (-\infty, +\infty)$. Alors $J_\epsilon \ni \mu \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega_0, \mu, \epsilon)$, $\epsilon = \pm 1$, est une fonction convexe.*

Preuve Proposition 2.17.
La démonstration repose essentiellement sur la relation (1.67) liant la fonction de partition grand-canonique aux fonctions de partition canonique.
Soient $\mu_i \in J_\epsilon$, avec $i \in \{1, 2\}$. Soient $\gamma \in (0, 1)$ un réél et $N \geq 1$ entier. On a :

$$\sum_{n=0}^{N} \mathrm{e}^{n\beta(\gamma\mu_1 + (1-\gamma)\mu_2)} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon) = \sum_{n=0}^{N} \Big[\mathrm{e}^{n\beta\mu_1} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big]^\gamma \Big[\mathrm{e}^{n\beta\mu_2} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big]^{1-\gamma} \tag{2.26}$$

Comme $\gamma \in (0, 1)$, alors $p := \frac{1}{\gamma} > 1$ et $q := \frac{1}{1-\gamma} > 1$ vérifient : $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.
A partir de (2.26), l'inégalité de Hölder permet d'écrire :

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{N} &\Big[\mathrm{e}^{n\beta\mu_1} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big]^\gamma \Big[\mathrm{e}^{n\beta\mu_2} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big]^{1-\gamma} \\ &\leq \Big(\sum_{n=0}^{N} \mathrm{e}^{n\beta\mu_1} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big)^\gamma \Big(\sum_{n=0}^{N} \mathrm{e}^{n\beta\mu_2} Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon)\Big)^{1-\gamma}\end{aligned} \tag{2.27}$$

Puisque $\gamma\mu_1 + (1-\gamma)\mu_2 \in J_\epsilon$, en prenant la limite $N \to \infty$ dans (2.27) sachant (1.67) :

$$\Xi_\Lambda\big(\beta, \omega_0, \gamma\mu_1 + (1-\gamma)\mu_2, \epsilon\big) \leq \Big(\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, \mu_1, \epsilon)\Big)^\gamma \Big(\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, \mu_2, \epsilon)\Big)^{1-\gamma}$$

Puis en utilisant la définition de la pression grand-canonique à volume fini (1.52) :

$$P_\Lambda\big(\beta, \omega_0, \gamma\mu_1 + (1-\gamma)\mu_2, \epsilon\big) \leq \gamma P_\Lambda(\beta, \omega_0, \mu_1, \epsilon) + (1-\gamma) P_\Lambda(\beta, \omega_0, \mu_2, \epsilon)$$

L'inégalité ci-dessus est valable pour tout $\gamma \in [0, 1]$, ce qui achève la preuve.

■

2.5 Transfert des propriétés d'analycité

Dans de ce paragraphe, on transfère les propriétés d'analycité de la pression grand-canonique sur la fonction de partition et la densité grand-canonique à volume fini.

Compte-tenu de (1.52) et (2.3), pour tout $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, le prolongement analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ de la fonction de partition grand-canonique à volume fini s'écrit :

$$\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \exp\Big(\epsilon \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \ln\big(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\big)\Big) = \big(\det\big\{\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega_0)}\big\}\big)^\epsilon \tag{2.28}$$

A partir du Théorème 2.1 et en vertu du fait que la fonction $u \mapsto \mathrm{e}^u$ soit entière sur $\mathbb{C}$, on a immédiatement le corollaire suivant :

Corollaire 2.18. *Soit $\beta > 0$. Alors pour chaque ensemble ouvert et borné $\mathcal{K}$ tel que $\overline{\mathcal{K}} \subset \mathcal{D}_\epsilon$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que la fonction de partition grand-canonique $\Xi_\Lambda(\beta, \cdot, \cdot, \epsilon)$ soit jointement analytique en (ω, z) sur $\mathcal{N}_\Lambda \times \mathcal{K}$.*

Compte-tenu de (1.53) et (2.3), pour tout $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, le prolongement analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ de la densité grand-canonique à volume fini s'écrit :

$$\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \beta z \partial_z P_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda|} \frac{i}{2\pi} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda)} \left\{ \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi \, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon} (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \right\} \tag{2.29}$$

où $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ est un sous-ensemble compact tel que $z \in K$ et Γ_K est un contour orienté positivement du type (2.14). Notons que $\xi \mapsto (\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon)^{-1}$ n'est autre que la fonction distribution de Bose-Einstein lorsque $\epsilon = -1$ et de Fermi-Dirac lorsque $\epsilon = +1$.

On a immédiatement le corollaire suivant :

Corollaire 2.19. *Soit $\beta > 0$. Alors pour chaque ensemble ouvert et borné $\mathcal{K}$ tel que $\overline{\mathcal{K}} \subset \mathcal{D}_\epsilon$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que la densité grand-canonique à volume fini $\rho_\Lambda(\beta, \cdot, \cdot, \epsilon)$ soit jointement analytique en (ω, z) sur $\mathcal{N}_\Lambda \times \mathcal{K}$.*

3 Susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini

D'après la Proposition 2.8, pour tout $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0)) \cap \mathbb{R}_+^*$, il existe un intervalle centré en ω_0 sur lequel $P_\Lambda(\beta, \cdot, z, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$. En vertu de la Définition 1.34, les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini sont bien définies :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_\Lambda^n(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \frac{\partial^n P_\Lambda}{\partial B^n}(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n P_\Lambda}{\partial \omega^n}(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$$

Comme corollaire du Théorème 2.1, on a le résultat d'analycité globale :

Corollaire 2.20. *Soit $\beta > 0$. Alors pour chaque ensemble ouvert et borné $\mathcal{K}$ tel que $\overline{\mathcal{K}} \subset \mathcal{D}_\epsilon$, $\epsilon = \pm 1$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que $\mathcal{X}_\Lambda^n(\beta, \cdot, \cdot, \epsilon)$, avec $n \in \mathbb{N}^*$, soit jointement analytique en (ω, z) sur $\mathcal{N}_\Lambda \times \mathcal{K}$.*

L'objectif de ce paragraphe est de construire le prolongement analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ de $\mathcal{X}_\Lambda^n(\beta, \omega_0, \cdot, \epsilon)$ pour chaque $n \in \mathbb{N}^*$. En particulier, on prouve le Théorème 2.2.

Pour cela, rappelons les notations introduites dans la section 1 "résultats principaux". Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$. Soient $S_{j,\Lambda}(\omega_0, \xi)$, $j \in \{1, 2\}$, les opérateurs bornés :

$$S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) = \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x}))(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1}, \quad S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi) = \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1}$$

Puisque $(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} L^2(\Lambda) \to D(H_\Lambda(\omega_0)) \subset \mathcal{Q}(H_\Lambda(0))$ (cf. paragraphe 3.2, chapitre 1), alors $S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ en vertu de (1.29). Et même $S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi) \in \mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$ en vertu de (1.49) (suivi de la première équation résolvante).
Pour tout couple $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$, introduisons :

$$S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi) = \delta\omega S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) + (\delta\omega)^2 S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi), \quad \delta\omega = \omega - \omega_0$$

Pour $k \in \mathbb{N}^*$ et $(i_1, \dots, i_k) \in \{1,2\}^k$, soit la famille d'opérateurs dans $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$:

$$J_{k,\Lambda}(i_1, \dots, i_k)(\omega_0, \xi) := (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \prod_{m=1}^{k} S_{i_m,\Lambda}(\omega_0, \xi)$$

Et pour tout entier $n \geq k \geq 1$, soit $\chi_k^n(i_1, \dots, i_k)$ la fonction caractéristique définie par :

$$\chi_k^n(i_1, \dots, i_k) := \begin{cases} 1 & \text{si } i_1 + \cdots + i_k = n \\ 0 & \textit{sinon} \end{cases}$$

La preuve du Théorème 2.2 repose essentiellement sur le résultat suivant :

Proposition 2.21. *Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$. Soit $\mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\omega_0)$ un voisinage complexe de ω_0 sur lequel la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique. Alors pour tout $\omega \in \mathcal{V}_{\Lambda,\xi}(\omega_0)$,*

$$(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega - \omega_0)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \tag{2.30}$$

avec pour tout entier $n \geq 1$, en tant qu'opérateur dans $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$:

$$\frac{\partial^n}{\partial \omega^n} (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} := n! \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1, \dots, i_k) J_{k,\Lambda}(i_1, \dots, i_k)(\omega_0, \xi) \tag{2.31}$$

Preuve Proposition 2.21.
Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega_0))$. Puisque $\{H_\Lambda(\omega),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est une famille analytique de type (A), il existe un voisinage complexe $\nu_\xi(\omega_0)$ de ω_0 tel que $\forall\, \omega \in \nu_\xi(\omega_0)$, $\xi \in \rho(H_\Lambda(\omega))$ et $\nu_\xi(\omega_0) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est $\mathfrak{B}$-analytique (voir par ex. [60]). La seconde équation résolvante itérée n-fois donne au sens des opérateurs bornés (et même de Hilbert-Schmidt) :

$$\begin{aligned} \forall\, \omega \in \nu_\xi(\omega_0), \quad (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1} = (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} + (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} \sum_{k=1}^{n} (-1)^k (S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi))^k + \\ + (-1)^{n+1} (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1} (S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi))^{n+1} \end{aligned} \tag{2.32}$$

Utilisant que $S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi) = \delta\omega S_{1,\Lambda}(\omega_0, \xi) + (\delta\omega)^2 S_{2,\Lambda}(\omega_0, \xi)$, on a :

$$\sum_{k=1}^{n} (-1)^k (S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi))^k = \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} (\delta\omega)^{i_1 + \cdots + i_k} \prod_{m=1}^{k} S_{i_m,\Lambda}(\omega_0, \xi)$$

Et puisque pour $i_j \in \{1,2\}$, $k \leq i_1 + \cdots + i_k \leq 2k$; en utilisant la fonction indicatrice :

$$\sum_{k=1}^{n} (-1)^k (S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi))^k = \sum_{l=1}^{2n} (\delta\omega)^l \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^l(i_1, \dots, i_k) \prod_{m=1}^{k} S_{i_m,\Lambda}(\omega_0, \xi)$$

En décomposant le membre de droite en deux sommes (l'une dont l'indice l varie de 1 à n, l'autre de $n+1$ à $2n$) et en explicitant l'opérateur $(S_\Lambda(\omega, \omega_0, \xi))^{n+1}$ par les mêmes arguments que ceux utilisés ci-dessus, (2.32) peut alors se réécrire :

$$\forall\, \omega \in \nu_\xi(\omega_0), \quad (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1} = (H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1} + \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \mathcal{S}_{k,\Lambda}(\omega_0, \xi) + \mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega, \omega_0, \xi) \tag{2.33}$$

avec respectivement :

$$\mathcal{S}_{k,\Lambda}(\omega_0,\xi) := \sum_{l=1}^{k}(-1)^l \sum_{i_j\in\{1,2\}^l} \chi_l^k(i_1,\dots,i_l) J_{l,\Lambda}(i_1,\dots,i_l)(\omega_0,\xi), \quad k\in\{1,\dots,n\} \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega,\omega_0,\xi) :=& \\ (\delta\omega)^{n+1}\Big\{ \sum_{k=0}^{n-1}(\delta\omega)^k \sum_{l=1}^{n}(-1)^l \sum_{i_j\in\{1,2\}^l} \chi_l^{k+n+1}(i_1,\dots,i_l) J_{l,\Lambda}(i_1,\dots,i_l)(\omega_0,\xi) + \\ + (-1)^{n+1}\sum_{k=0}^{n+1}(\delta\omega)^k \sum_{i_j\in\{1,2\}^{n+1}} \chi_{n+1}^{k+n+1}(i_1,\dots,i_{n+1})(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}\prod_{m=1}^{n+1} S_{i_m,\Lambda}(\omega_0,\xi)\Big\}\end{aligned} \tag{2.35}$$

Dans (2.34), la somme $\sum_{l=1}^{n}$ est réduite en $\sum_{l=1}^{k}$ puisque $\chi_l^k(i_1,\dots,i_l)=0$ lorsque $k<l$. Montrons maintenant que pour ω suffisamment proche de ω_0 :

$$\|\mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega,\omega_0,\xi)\| = \mathcal{O}(|\delta\omega|^{n+1}) \tag{2.36}$$

D'une part $(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}$ est uniformément borné. Par suite, il existe une constante $c=c(a_\infty)>0$ telle que $\|S_{2,\Lambda}(\omega_0,\xi)\|\le c$ uniformément en ξ. En vertu de l'estimation (1.29), il existe une autre constante $c=c(a_\infty)>0$ telle que $\|S_{1,\Lambda}(\omega_0,\xi)\|\le c(1+|\xi|)$. Ainsi $\forall\, l\in\{1,\dots,n\}$, il existe un polynôme $p_l(|\xi|)$ tel que :

$$\forall\, i_j\in\{1,2\},\quad \|J_{l,\Lambda}(i_1,\dots,i_l)(\omega_0,\xi)\| \le \|(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1}\|\prod_{m=1}^{l}\|S_{i_m,\Lambda}(\omega_0,\xi)\| \le p_l(|\xi|) \tag{2.37}$$

l'indice l dans $p_l(|\xi|)$ signifiant que son degré maximal est proportionnel à l.
D'autre part pour tout $\omega\in\nu_\xi(\omega_0)$, $(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}$ est uniformément borné en ω. Par les mêmes arguments que ceux utilisés ci-dessus, pour tout entier $n\ge 1$, il existe un polynôme $p_{n+1}(|\xi|)$ tel que pour tout $\omega\in\nu_\xi(\omega_0)$:

$$\forall\, i_j\in\{1,2\},\quad \|(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}\|\prod_{m=1}^{n+1}\|S_{i_m,\Lambda}(\omega_0,\xi)\| \le p_{n+1}(|\xi|) \tag{2.38}$$

Compte-tenu de (2.35), les estimations (2.37) et (2.38) prouvent (2.36) pour ω suffisamment proche de ω_0. Ainsi par construction, $\mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\cdot\,,\omega_0,\xi)$ satisfait la propriété que ses n premières dérivées partielles (par rapport à la variable ω) évaluées en ω_0 sont égales à 0. Il s'ensuit alors de (2.33) l'identification dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$:

$$\frac{\partial^n}{\partial\omega^n}(H_\Lambda(\omega_0)-\xi)^{-1} := n!\,\mathcal{S}_{n,\Lambda}(\omega_0,\xi) \tag{2.39}$$

D'autre part d'après la Proposition 2.10, il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}_\xi(\omega_0)$ de ω_0 sur lequel la fonction à valeurs opérateurs $\omega\mapsto(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique. Par unicité du développement en série entière sur $\mathcal{V}_\xi(\omega_0)\cap\nu_\xi(\omega_0)$, (2.39) reste valable dans $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$.

■

Preuve Théorème 2.2.
Soient $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ compact tel que $z \in K$. Soient Γ_K le contour défini en (2.21) et $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$ le disque de centre ω_0 et de rayon $r_{\omega_0} > 0$ introduit dans la preuve de la Proposition 2.8. On a vu que pour tout $\xi \in \Gamma_K$, la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est $\mathfrak{B}$-analytique sur $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$.
A partir de (2.25), $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, on a au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$:

$$\ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z, \xi) \left(\sum_{k=0}^{n} (\delta\omega)^k \mathcal{S}_{k,\Lambda}(\omega_0, \xi) + \mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega, \omega_0, \xi) \right)$$

avec $\mathcal{S}_{k,\Lambda}(\omega_0, \xi)$ et $\mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega, \omega_0, \xi)$ définis respectivement par (2.34) et (2.35).
Comme la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right)$ est aussi $\mathfrak{B}$-analytique sur $D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$ (conséquence du théorème d'holomorphie sous le signe intégrale dans (2.25)), alors pour assurer l'identification (2.10) dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$, la seule chose à vérifier est que pour ω suffisamment proche de ω_0 :

$$\int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|\mathcal{S}_{n+1,\Lambda}(\omega, \omega_0, \xi)\| = \mathcal{O}(|\delta\omega|^{n+1}) \tag{2.40}$$

D'une part l'estimation (2.37) est valable $\forall\, \xi \in \Gamma_K$ car $(H_\Lambda(\omega_0) - \xi)^{-1}$ est uniformément borné en ξ. D'après le Lemme 2.7, il existe une constante $c = c(\beta, K, l) > 0$ telle que :

$$\forall\, z \in K, \quad \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|J_{l,\Lambda}(i_1, \ldots, i_l)(\omega_0, \xi)\| \leq c < +\infty \tag{2.41}$$

D'autre part, comme pour tout $\omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, $(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est uniformément borné en ξ (et ω), l'estimation (2.38) est encore valable $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$. D'après le Lemme 2.7, il existe une autre constante $c = c(\beta, K, n+1) > 0$ telle que $\forall\, z \in K$ et $\forall\, \omega \in D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$:

$$\forall\, i_j \in \{1, 2\}, \quad \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}\| \prod_{m=1}^{n+1} \|S_{i_m,\Lambda}(\omega_0, \xi)\| \leq c < +\infty \tag{2.42}$$

Utilisant (2.35), les estimations (2.41) et (2.42) prouvent (2.40) pour ω proche de ω_0.
Enfin, en utilisant la preuve de la Proposition 2.8, il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}(\omega_0)$ de ω_0 sur lequel la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto \ln\left(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)}\right)$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. Par unicité du développement en série enitère sur $\mathcal{V}(\omega_0) \cap D_K(\omega_0, r_{\omega_0})$, l'identification (2.10) reste valable dans $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$.

■

4 Appendice 1 : Energie libre et susceptibilités canonique

Ici les paramètres extérieurs (fixés) sont ceux du formalisme canonique de la mécanique statistique quantique, à savoir "l'inverse" de la température $\beta > 0$, le nombre de particules $n_\Lambda \geq 1$ et $|\Lambda|$ le volume du confinement du gaz. La densité de particules $\rho_0 > 0$ (fixée) est liée au nombre de particules par la relation : $n_\Lambda = \rho_0 |\Lambda|$.

Rappelons que pour tout $\beta > 0$, $\rho_0 > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, l'énergie libre (canonique) de Helmholtz à volume fini est définie par (cf. paragraphe 5.2, chapitre 1) :

$$f_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := -\frac{1}{\beta} \ln \big(Z_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \big) \tag{2.43}$$

où $Z_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon)$ désigne la fonction de partition canonique du gaz quantique confiné.

Le but de cet appendice est de transférer l'analycité (sur un voisinage complexe de l'axe réél) de $\omega \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)$ sur l'énergie libre de Helmholtz. On utilise pour cela une relation "intégrale" liant la fonction de partition canonique à la pression grand-canonique à volume fini (voir [29]). Les deux principaux ingrédients permettant d'établir cette relation sont : premièrement, l'analycité de $z \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ sur un voisinage complexe de $z = 0$ et deuxièmement, la relation liant la fonction de partition grand-canonique aux fonctions de partition canonique :

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0)) \cap \mathbb{R}_+^*, \quad \Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n, \epsilon) \tag{2.44}$$

Voici le résultat principal de cet appendice qui est en fait un corollaire du Théorème 2.1 :

Corollaire 2.22. *Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$ fixés. Alors il existe un voisinage $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que l'énergie libre canonique $f_\Lambda(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ soit analytique en ω sur $\mathcal{N}_\Lambda$.*

Le Corollaire 2.22 garantissant que $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto f_\Lambda(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$, on peut définir les susceptibilités généralisées canonique à volume fini comme les dérivées partielles de l'énergie libre spécifique (i.e. énergie libre par unité de volume) par rapport à l'intensité du champ magnétique B, voir Définition 1.44 :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{M}_\Lambda^n(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := -\frac{1}{|\Lambda|} \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\partial^n f_\Lambda}{\partial \omega^n}(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon)$$

A partir du Corollaire 2.22, il vient immédiatement :

Corollaire 2.23. *Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$ fixés. Alors il existe un voisinage $\mathcal{N}_\Lambda$ de l'axe réél tel que $\mathcal{N}_\Lambda \ni \omega \mapsto \mathcal{M}_\Lambda^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$, avec $n \in \mathbb{N}^*$, soit analytique.*

Le reste de cette section est consacré à la preuve du Corollaire 2.22.
Par la même méthode que celle utilisée dans [29], on établit d'abord :

Proposition 2.24. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $\rho_0 > 0$ et $n_\Lambda = \rho_0|\Lambda|$ le nombre de particules. La fonction de partition canonique est liée à la pression grand-canonique par :*

$$Z_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}z\, \frac{1}{z} \left[\frac{\exp\big(\frac{\beta}{\rho_0} P_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)\big)}{z} \right]^{n_\Lambda} \tag{2.45}$$

avec $\mathcal{C}$ un contour fermé autour de $z = 0$, inclus dans le domaine d'analycité $\mathcal{D}_\epsilon$ de $P_\Lambda(\beta, \omega_0, \cdot\,, \epsilon)$. De plus, $Z_\Lambda(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ peut être prolongé analytiquement sur un voisinage complexe $\mathcal{V}_\Lambda$ de l'axe réél.

Preuve Proposition 2.24.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\mathfrak{g}_\epsilon : \mathcal{D}_\epsilon \setminus \{0\} \to \mathbb{C}$ la fonction définie par :

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_\epsilon \setminus \{0\}, \quad \mathfrak{g}_\epsilon(z) := \frac{\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)}{z^{n_\Lambda+1}}$$

avec $\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ la fonction de partition grand-canonique (2.28). Compte-tenu du Corollaire 2.18, $\Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, \cdot\,, \epsilon)$ est analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon$ (comme composée de fonctions analytiques). Par conséquent, $\mathfrak{g}_\epsilon(\cdot\,)$ est analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon \setminus \{0\}$.
Soit $\mathcal{C}$ un contour fermé inclus dans le domaine d'analycité $\mathcal{D}_\epsilon \setminus \{0\}$ de $\mathfrak{g}_\epsilon(\cdot\,)$ et contournant la singularité (non essentielle) 0. Par exemple on peut choisir :

$$\mathcal{C} := \left\{ r\mathrm{e}^{i\phi},\ r = \mathrm{e}^{\beta E_0(0)}/2,\ \phi \in [0, 2\pi] \right\}$$

Le théorème des résidus permet alors d'écrire :

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}z\, \mathfrak{g}_\epsilon(z) = \mathrm{Res}(\mathfrak{g}_\epsilon, 0) \quad \text{avec} \quad \mathrm{Res}(\mathfrak{g}_\epsilon, 0) = \frac{1}{n_\Lambda!} \frac{\partial^{n_\Lambda} \Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)}{\partial z^{n_\Lambda}} \bigg|_{z=0} \tag{2.46}$$

L'expression (2.44), qui peut être étendue pour des z complexes avec $|z|$ suffisamment petit (par unicité du développement en série entière), permet l'identification :

$$\frac{\partial^{n_\Lambda} \Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)}{\partial z^{n_\Lambda}} \bigg|_{z=0} = n_\Lambda!\, Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n_\Lambda, \epsilon) \tag{2.47}$$

En insérant (2.47) dans (2.46) puis en utilisant la relation (2.28), on obtient (2.45).
Construisons un prolongement analytique de $Z_\Lambda(\beta, \cdot\,, n_\Lambda, \epsilon)$ sur un voisinage de l'axe réél. D'après le Corollaire 2.18, pour tout $z \in \mathcal{C}$, il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}_\Lambda$ de l'axe réél sur lequel la fonction de partition grand-canonique $\Xi_\Lambda(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)$ est analytique. Ceci assure que pour tout compact $\Omega \subset \mathcal{V}_\Lambda$, il existe une constante $c = c(\beta, \Omega, \mathcal{C}, |\Lambda|) > 0$ telle que :

$$\sup_{\omega \in \Omega} |\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)| \leq c$$

Le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale garantit alors que la fonction :

$$\omega \mapsto \hat{Z}_\Lambda(\beta, \omega, n_\Lambda, \epsilon) := \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}z\, \frac{\Xi_\Lambda(\beta, \omega, z, \epsilon)}{z^{n_\Lambda+1}} \tag{2.48}$$

est analytique sur $\mathcal{V}_\Lambda$. Puisque pour $\omega_0 \in \mathbb{R}$, $\hat{Z}_\Lambda(\beta, \omega_0, n_\Lambda, \epsilon)$ coïncide avec $Z_\Lambda(\beta, \omega_0, n_\Lambda, \epsilon)$, alors (2.48) n'est autre que le prolongement analytique de $Z_\Lambda(\beta, \cdot\,, n_\Lambda, \epsilon)$ sur $\mathcal{V}_\Lambda$.

■

Remarque 2.25. Notons que (2.44) et (2.45) assurent que (2.43) est bien définie car :

$$0 < Z_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \leq z^{-\rho_0|\Lambda|} \Xi_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon) < +\infty$$

Preuve Corollaire 2.22.
Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$. Soit $\mathcal{V}_\Lambda$ un voisinage complexe de l'axe réél sur lequel $Z_\Lambda(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ est analytique. D'après la Remarque 2.25, pour tout $\omega_0 \in \mathbb{R}$, $Z_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) > 0$. Il s'ensuit par un argument de continuité qu'il existe un voisinage complexe ν_Λ de l'axe réél, tel que pour tout $\omega \in \nu_\Lambda$ on ait $\Re Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) > 0$. Puisque la fonction $z \mapsto \ln z$ est analytique sur $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$, alors $\mathcal{V}_\Lambda \cap \nu_\Lambda \ni \omega \mapsto \ln(Z_\Lambda(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon))$ est analytique comme composée de fonctions analytiques. D'où l'analycité de $\mathcal{V}_\Lambda \cap \nu_\Lambda \ni \omega \mapsto f_\Lambda(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$.

■

5 Appendice 2 : Grandeurs grand-canonique à densité fixée

La température et la densité de particules sont les deux paramètres extérieurs usuellement considérés dans les problèmes en physique. Cependant, d'un point de vue théorique, les grandeurs définies dans l'ensemble canonique sont généralement difficiles à exploiter. Il suffit pour s'en convaincre de regarder le cas de l'énergie libre (2.43) compte-tenu de la relation (2.45). La raison principale est que la fonction de partition canonique ne peut s'exprimer comme un produit de sommes indépendantes (contrairement à la fonction de partition grand-canonique). Il n'est alors pas possible d'exprimer directement les grandeurs canonique à volume fini en termes des valeurs propres de l'Hamiltonien à une particule.

Pour pallier ce problème, un des moyens utilisés est de considérer les grandeurs grand-canonique à densité de particules fixée. La définition de ces grandeurs peut être rigoureusement justifiée puisqu'elle repose sur la possibilité d'inverser la relation liant la fugacité à la densité grand-canonique. Comme on va le voir ci-dessous, l'étude des grandeurs grand-canonique à densité fixée caractéristiques de la réponse (dia)magnétique peut être transférée à l'étude de la transformée de Legendre de la pression grand-canonique à volume fini et de ses dérivées par rapport à l'intensité du champ magnétique B.

Après avoir introduit la pression et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini et à densitée fixée, l'objectif est de démontrer qu'il existe une relation liant la dérivée première (respectivement seconde) par rapport à l'intensité du champ magnétique de la transformée de Legendre de la pression grand-canonique à l'aimantation (respectivement susceptibilité magnétique) grand-canonique à densitée fixée.

Cependant il n'y a *aucune connexion évidente à volume fini* entre la transformée de Legendre de la pression grand-canonique (et ses dérivées partielles par rapport à B) et l'énergie libre canonique (et les susceptibilités généralisées canonique).

Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient I_ϵ et J_ϵ, avec $\epsilon = \pm 1$, les intervalles définis par :

$$I_{-1} = I_{-1}(\omega_0) := \mathcal{D}_{-1}(E_0(\omega_0)) \cap \mathbb{R}_+^* = (0, \mathrm{e}^{\beta E_0(\omega_0)}), \quad I_{+1} := \mathcal{D}_{+1}(E_0(\omega_0)) \cap \mathbb{R}_+^* = \mathbb{R}_+^* \tag{2.49}$$

$$J_{-1} = J_{-1}(\omega_0) := (-\infty, E_0(\omega_0)), \quad J_{+1} := (-\infty, +\infty) \tag{2.50}$$

D'après (1.57), la densité de particules grand-canonique à volume fini est définie par :

$$\forall\, \mu \in J_\epsilon, \quad \rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) := \frac{\partial P_\Lambda}{\partial \mu}(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{\beta(\mu - e_j(\omega_0))}}{1 + \epsilon \mathrm{e}^{\beta(\mu - e_j(\omega_0))}} > 0$$

Supposons que la densité de particules $\rho_0 > 0$ soit fixée. Soit $\mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ l'unique solution de l'équation $\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$, voir Lemme 2.27.
Introduisons la pression grand-canonique à volume fini et à densité fixée définie par :

$$P_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := P_\Lambda\big(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon)}, \epsilon\big) \tag{2.51}$$

ainsi que les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini et à densité fixée :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_\Lambda^n(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := \mathcal{X}_\Lambda^n\big(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon)}, \epsilon\big) \tag{2.52}$$

La transformée de Legendre de la pression grand-canonique à volume fini est définie par :

$$\mathcal{F}_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := \sup_{\mu \in J_\epsilon} \big(\rho_0 \mu - P_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)\big) \tag{2.53}$$

Voici le résultat principal de cet appendice :

Proposition 2.26. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\rho_0 > 0$ la densité de particules fixée. Soit $\mu_\Lambda := \mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ l'unique solution de l'équation $\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$. Alors l'aimantation grand-canonique à volume fini et à densité fixée vérifie :*

$$\mathcal{X}^1_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) := \mathcal{X}^1_\Lambda\big(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda}, \epsilon\big) = -\left(\frac{q}{c}\right)\frac{\partial \mathcal{F}_\Lambda}{\partial \omega}(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \tag{2.54}$$

Et la susceptibilité magnétique grand-canonique à volume fini et à densité fixée vérifie :

$$\mathcal{X}^2_\Lambda(\beta, \omega_0 = 0, \rho_0, \epsilon) := \mathcal{X}^2_\Lambda\big(\beta, \omega_0 = 0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda}, \epsilon\big) = -\left(\frac{q}{c}\right)^2\frac{\partial^2 \mathcal{F}_\Lambda}{\partial \omega^2}(\beta, \omega_0 = 0, \rho_0, \epsilon) \tag{2.55}$$

Le reste de cet appendice est consacré à la preuve de la Proposition 2.26.
On justifie d'abord qu'il est possible d'inverser la relation liant la fugacité à la densité :

Lemme 2.27. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\rho_0 > 0$ fixé. Alors il existe un unique $\mu_\Lambda = \mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ solution de l'équation :*

$$\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0 \tag{2.56}$$

Preuve Lemme 2.27.
Pour $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, la fonction $\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\cdot}, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ (et même analytique réélle) en la variable μ. En effet, d'une part $J_\epsilon \ni \mu \mapsto \mathrm{e}^{\beta\mu}$ est analytique réélle, d'autre part $I_\epsilon \ni z \mapsto \rho_\Lambda(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ est analytique réélle d'après le Corollaire 2.19. Comme $I_\epsilon = \mathrm{e}^{\beta J_\epsilon}$, il s'ensuit que $J_\epsilon \ni \mu \mapsto P_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)$ est analytique réélle comme composée de deux fonctions analytiques réélles (voir par ex. [67]). D'autre part :

$$\forall\, \mu \in J_\epsilon, \quad \frac{\partial \rho_\Lambda}{\partial \mu}(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \frac{\beta}{|\Lambda|}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\beta(\mu - e_j(\omega_0))}}{\big(1 + \epsilon \mathrm{e}^{\beta(\mu - e_j(\omega_0))}\big)^2} > 0 \tag{2.57}$$

ce qui garantit que $\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\cdot}, \epsilon)$ est strictement croissante sur son ensemble de définition. Le théorème d'inversion globale assure que $\rho_\Lambda(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\cdot}, \epsilon)$ est un $\mathcal{C}^\infty$-difféomorphisme de J_ϵ sur $(0, +\infty)$. Il s'ensuit alors l'existence d'un unique $\mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ vérifiant (2.56).

■

Ainsi la possibilité d'inverser la relation densité-fugacité permet de définir la pression et les susceptibilités généralisées grand-canonique à densité fixée, voir (2.51) et (2.52).

Preuve Proposition 2.26.
Soient $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 > 0$. Soit $\mu_\Lambda := \mu_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon)$ l'unique solution de (2.56).
La transformée de Legendre de la pression grand-canonique à volume fini (2.53) s'écrit :

$$\mathcal{F}_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) = \rho_0\mu_\Lambda - P_\Lambda\big(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda}, \epsilon\big) = \rho_0\mu_\Lambda - P_\Lambda(\beta, \omega_0, \rho_0, \epsilon) \tag{2.58}$$

Montrons à partir de (2.58) que $\mathcal{F}_\Lambda(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un voisinage de ω_0.
D'une part, la fonction $(\omega, \mu) \mapsto \rho_\Lambda(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) - \rho_0$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ (cf. Corollaire 2.19) sur un voisinage de (ω_0, μ_Λ), couple solution de l'équation $\rho_\Lambda(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) - \rho_0 = 0$. D'autre part, $(\partial_\mu \rho_\Lambda)(\beta, \omega_0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda}, \epsilon) \neq 0$ en vertu de (2.57). Par conséquent, $\mu_\Lambda(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un voisinage de ω_0 d'après le théorème des fonctions implicites. Egalement

$P_\Lambda(\beta,\cdot\,,\mathrm{e}^{\beta\cdot},\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un voisinage de (ω_0,μ_Λ). On utilise pour conclure que la composée de fonctions de classe $\mathcal{C}^\infty$ l'est encore. A partir de (2.58), en dérivant une fois :

$$\frac{\partial}{\partial\omega}\big[\mathcal{F}_\Lambda(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon)\big]\Big|_{\omega=\omega_0} = \rho_0\frac{\partial\mu_\Lambda}{\partial\omega}(\beta,\omega_0,\rho_0,\epsilon) - \frac{\partial P_\Lambda}{\partial\omega}\big(\beta,\omega_0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon\big) - \frac{\partial\mu_\Lambda}{\partial\omega}(\beta,\omega_0,\rho_0,\epsilon)\frac{\partial P_\Lambda}{\partial\mu}\big(\beta,\omega_0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon\big)$$

Il suffit d'utiliser que $(\partial_\mu P_\Lambda)(\beta,\omega_0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon) = \rho_\Lambda(\beta,\omega_0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon) = \rho_0$ pour obtenir (2.54). En dérivant une seconde fois, il vient :

$$\frac{\partial^2}{\partial\omega^2}\big[\mathcal{F}_\Lambda(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon)\big]\Big|_{\omega=0} = -\frac{\partial^2 P_\Lambda}{\partial\omega^2}\big(\beta,0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon\big) - \frac{\partial\mu_\Lambda}{\partial\omega}(\beta,0,\rho_0,\epsilon)\frac{\partial^2 P_\Lambda}{\partial\mu\partial\omega}\big(\beta,0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon\big)$$

Il reste à utiliser une conséquence du théorème des fonctions implicites (sachant (2.57)) :

$$\frac{\partial\mu_\Lambda}{\partial\omega}(\beta,0,\rho_0,\epsilon) = -\frac{\partial\rho_\Lambda}{\partial\omega}(\beta,0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon)\cdot\left(\frac{\partial\rho_\Lambda}{\partial\mu}(\beta,0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon)\right)^{-1} \tag{2.59}$$

puis que $\omega\mapsto\rho_\Lambda(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est une fonction paire (cf. Lemme 4.18, chapitre 4) assurant que $(\partial_\omega\rho_\Lambda)(\beta,0,\mathrm{e}^{\beta\mu_\Lambda},\epsilon) = 0$; et par suite $(\partial_\omega\mu_\Lambda)(\beta,0,\rho_0,\epsilon) = 0$.

■

6 Appendice 3 : Une autre preuve de la Proposition 2.10

Dans cet appendice, on donne une autre démonstration (davantage technique) de la Proposition 2.10 basée sur l'utilisation du semi-groupe de générateur $H_\Lambda(\omega)$ avec $\omega\in\mathbb{C}$. Rappelons d'abord quelques une de ses propriétés ; on se référera pour cela à [60] et [112].

Semi-groupe de générateur $H_\Lambda(\omega)$, $\omega\in\mathbb{C}$

Puisque $\{H_\Lambda(\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est une famille d'opérateurs m-sectoriels (cf. Lemme 1.23), alors $H_\Lambda(\omega)$ est générateur d'un semi-groupe fortement continu :

$$W_\Lambda(\beta,\omega) := \mathrm{e}^{-\beta H_\Lambda(\omega)} \quad \beta\geq 0,\ \omega\in\mathbb{C}$$

$\{W_\Lambda(\beta,\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est une famille de semi-groupes quasi-bornés (terminologie Kato) :

<u>Lemme</u> 2.28. *Pour tout $\omega\in\mathbb{C}$, il existe une constante $c>0$ telle que :*

$$\forall\,\beta>0,\quad \|W_\Lambda(\beta,\omega)\|\leq c\mathrm{e}^{-\beta\gamma_{\delta_0}(\omega)} \tag{2.60}$$

où $\gamma_{\delta_0}(\omega)$ est le vertex du secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega)$, voir (1.34) *pour sa définition et Remarque 1.24.*

Preuve Lemme 2.28.
Soient $\beta>0$ et $\omega\in\mathbb{C}$. Soient $\theta_{\delta_0}(\omega)$ et $\gamma_{\delta_0}(\omega)$ le demi-angle et le vertex définis en (1.35) et (1.36) respectivement du secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega)$. Soient $\eta>0$ et $\epsilon_0>0$ satisfaisant $\epsilon_0<\frac{\pi}{2}-\theta_{\delta_0}(\omega)$. Soit $\Gamma\cup\mathcal{C}$, avec $\Gamma=\Gamma^+\cup\Gamma^-$, un contour orienté positivement où $\Gamma^\pm$ et $\mathcal{C}$ sont définis par :

$$\Gamma^\pm := \Big\{\xi\in\mathbb{C}\ :\ \arg(\xi-\gamma_{\delta_0}(\omega)) = \pm\Big(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}\Big)\ \text{avec}\ |\xi-\gamma_{\delta_0}(\omega)|\geq\frac{\eta}{\beta}\Big\} \tag{2.61}$$

$$\mathcal{C} := \Big\{\xi\in\mathbb{C}\ :\ \xi=\frac{\eta}{\beta}\mathrm{e}^{i\phi}+\gamma_{\delta_0}(\omega),\ \phi\in\Big[\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2},2\pi-\Big(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}\Big)\Big]\Big\} \tag{2.62}$$

Par construction, le secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega)$ se trouve à l'intérieur du contour $\Gamma\cup\mathcal{C}$. Par conséquent, le spectre (discret) de l'opérateur $H_\Lambda(\omega)$ est également à l'intérieur de $\Gamma\cup\mathcal{C}$. En vertu du calcul fonctionnel de Dunford [44], on a alors au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$:

$$W_\Lambda(\beta,\omega)=\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma\cup\mathcal{C}}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\beta\xi}(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1} \tag{2.63}$$

Etant donné le choix des contours $\Gamma^\pm$, on peut utiliser sur chacun d'eux l'estimation (1.37) sur la norme opérateur de la résolvante. Par des considérations géométriques, on peut montrer que $\|(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}\|\leq\left(\frac{\eta}{\beta}\sin\frac{\epsilon_0}{2}\right)^{-1}$ uniformément en $\xi\in\mathcal{C}$. Il vient alors :

$$\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|\leq\frac{1}{2\pi}\left\{c_{\epsilon_0}\int_{\Gamma^+\cup\Gamma^-}|\mathrm{d}\xi|\,\frac{|\mathrm{e}^{-\beta\xi}|}{|\xi-\gamma_{\delta_0}(\omega)|}+\frac{\beta}{\eta}\frac{1}{\sin\frac{\epsilon_0}{2}}\int_{\mathcal{C}}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathrm{e}^{-\beta\xi}|\right\} \tag{2.64}$$

Utilisons le paramétrage $\xi=r\mathrm{e}^{\pm i(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})}+\gamma_{\delta_0}(\omega)$ avec $r\in\left[\frac{\eta}{\beta},+\infty\right)$ sur les contours $\Gamma^\pm$, et $\xi=\frac{\eta}{\beta}\mathrm{e}^{i\phi}+\gamma_{\delta_0}(\omega)$ avec $\phi\in\left[\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2},2\pi-\left(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}\right)\right]$ sur le contour $\mathcal{C}$. Ainsi :

$$\begin{aligned}&\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|\\&\leq\frac{\mathrm{e}^{-\beta\gamma_{\delta_0}(\omega)}}{2\pi}\left\{2c_{\epsilon_0}\int_{\frac{\eta}{\beta}}^{+\infty}\mathrm{d}r\,\frac{\mathrm{e}^{-\beta r\cos(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})}}{r}+\frac{1}{\sin\frac{\epsilon_0}{2}}\int_{\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}}^{2\pi-(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})}\mathrm{d}\phi\,\mathrm{e}^{-\beta\frac{\eta}{\beta}\cos\phi}\right\}\end{aligned} \tag{2.65}$$

En utilisant que $\cos(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})\geq\cos(\frac{\pi}{2}-\frac{\epsilon_0}{2})=\sin\frac{\epsilon_0}{2}>0$ et par le changement de variable $x:=\beta r$ dans la première intégrale, on prouve l'existence d'une constante $c=c(\epsilon_0)>0$ majorant uniformément en β la quantité entre accolades dans (2.65).

■

Il reste à noter que la famille $\{W_\Lambda(\beta,\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est $\mathfrak{B}$-analytique, conséquence directe du fait que $\{H_\Lambda(\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est une famille analytique de type (A) (cf. Lemme 1.19). Comme corollaire de la Proposition 2.10 on a même :

Corollaire 2.29. *Soit $\beta>0$. $\{W_\Lambda(\beta,\omega),\ \omega\in\mathbb{C}\}$ est une famille d'opérateurs $\mathfrak{I}_1$-entière.*

Preuve Corollaire 2.29.
Soient $\beta>0$ et $\hat\omega\in\mathbb{C}$. Soient $\eta>0$ et $\epsilon_0>0$ satisfaisant $\epsilon_0<\frac{\pi}{2}-\theta_{\delta_0}(\hat\omega)$. Soit $\Gamma\cup\mathcal{C}$, avec $\Gamma=\Gamma^+\cup\Gamma^-$, un contour orienté positivement où $\Gamma^\pm$ et $\mathcal{C}$ sont définis en (2.61) et (2.62) respectivement. Par les mêmes arguments que ceux utilisés dans la preuve précédente, le spectre de l'opérateur $H_\Lambda(\hat\omega)$ se trouve à l'intérieur du contour $\Gamma\cup\mathcal{C}$. De plus, il existe un voisinage $\nu(\hat\omega)$ de $\hat\omega$ tel que pour tout $\omega\in\nu(\hat\omega)$, le spectre de $H_\Lambda(\omega)$ se trouve encore à l'intérieur du contour $\Gamma\cup\mathcal{C}$. Le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz donne alors au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$:

$$\forall\,\omega\in\nu(\hat\omega),\quad W_\Lambda(\beta,\omega)=\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma\cup\mathcal{C}}\mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-\beta\xi}(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}$$

Choisissons maintenant $\xi_0<\min\{-C_0,\gamma_{\delta_0}(\hat\omega)\}$ avec $|\xi_0|$ suffisamment large afin que pour tout $\omega\in\nu(\hat\omega)$, $\xi_0\in\rho(H_\Lambda(\omega))$. Par la première équation résolvante itérée 2 fois et en utilisant le théorème intégral de Cauchy (voir par ex. preuve de la Proposition 2.5) :

$$\forall\,\omega\in\nu(\hat\omega),\quad W_\Lambda(\beta,\omega)=\frac{i}{2\pi}\left(\int_{\Gamma\cup\mathcal{C}}\mathrm{d}\xi\,(\xi-\xi_0)^2\mathrm{e}^{-\beta\xi}(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}\right)(H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-2} \tag{2.66}$$

D'une part, le choix du contour assure que pour tout $\xi \in \Gamma \cup \mathcal{C}$, la fonction à valeurs opérateurs $\nu(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est $\mathfrak{B}$-analytique. D'autre part, $(H_\Lambda(\omega) - \xi)^{-1}$ est uniformément borné en $\omega \in \nu(\hat{\omega})$ et $\xi \in \Gamma \cup \mathcal{C}$ (par de simples arguments géométriques). Le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale garantit alors que la fonction à valeurs opérateurs entre parenthèses dans (2.66) est $\mathfrak{B}$-analytique sur $\nu(\hat{\omega})$. Aussi d'après le Corollaire 2.12, il existe un voisinage $\mathcal{V}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ sur lequel la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega) - \xi_0)^{-2}$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique. En utilisant (i) Lemme 2.11, $\omega \mapsto W_\Lambda(\beta, \omega)$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique sur $\nu(\hat{\omega}) \cap \mathcal{V}(\hat{\omega})$. Il reste à étendre cette propriété sur tout le plan complexe.

■

Autre démonstration de la Proposition 2.10

Voici la stratégie de la preuve en 4 étapes :

Etape 1 : on montre que pour tout $\beta > 0$ la famille d'opérateurs $\{W_\Lambda(\beta, \omega),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est $\mathfrak{I}_1$-analytique (et par conséquent $\mathfrak{I}_2$-analytique) en utilisant la théorie des perturbations des semi-groupes de Gibbs (voir par exemple [5] et [112]).
Etape 2 : on établit une estimation sur $\|W_\Lambda(\beta, \omega)\|_{\mathfrak{I}_2}$, avec $\omega \in \mathbb{C}$, de telle sorte que celle-ci soit intégrable par rapport à la variable β au voisinage de 0.
Etape 3 : via cette estimation, on transfère localement, i.e. dans un voisinage $\nu(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega} \in \mathbb{C}$ fixé, l'analycité (au sens de la topologie $\|\cdot\|_{\mathfrak{I}_2}$) du semi-groupe sur la résolvante $(H_\Lambda(\hat{\omega}) - \xi_0)^{-1}$ avec $\xi_0 < 0$ bien choisi. On utilisera pour cela la transformation de Laplace.
Etape 4 : on "transporte" cette propriété d'analycité locale par la première équation résolvante sur $(H_\Lambda(\hat{\omega}) - \xi)^{-1}$ pour $\xi \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$ quelconque.

Etapes 1 et 2

Pour tout $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, introduisons les opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda)$:

$$R_{1,\Lambda}(\beta, \omega_0) := s_{1,\Lambda}(\omega_0) W_\Lambda(\beta, \omega_0) = \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x})) W_\Lambda(\beta, \omega_0) \tag{2.67}$$

$$R_{2,\Lambda}(\beta, \omega_0) := s_{2,\Lambda} W_\Lambda(\beta, \omega_0) = \frac{1}{2} \mathbf{a}^2(\mathbf{x}) W_\Lambda(\beta, \omega_0) \tag{2.68}$$

Le fait que $R_{1,\Lambda}(\beta, \omega_0) \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ est prouvé en (2.72) ; $R_{2,\Lambda}(\beta, \omega_0) \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ découle de (1.42). Pour tout $(\omega, \omega_0) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$, posons $\delta\omega = \omega - \omega_0$. Introduisons l'opérateur borné :

$$R_\Lambda(\beta, \omega, \omega_0) := (H_\Lambda(\omega) - H_\Lambda(\omega_0)) W_\Lambda(\beta, \omega_0) = \delta\omega R_{1,\Lambda}(\beta, \omega_0) + (\delta\omega)^2 R_{2,\Lambda}(\beta, \omega_0) \tag{2.69}$$

Basé sur la théorie des perturbations des semi-groupes de Gibbs, on établit :

Proposition 2.30. *Soit $\{W_\Lambda(\beta, \omega)\}_{\beta \geq 0}$ le semi-groupe fortement continu de générateur $H_\Lambda(\omega)$, $\omega \in \mathbb{C}$. Alors $\{W_\Lambda(\beta, \omega)\}_{\beta > 0}$ est un semi-groupe de Gibbs (i.e. sa norme trace $\|\cdot\|_{\mathfrak{I}_1} < +\infty$). De plus pour tout $\beta > 0$, $\{W_\Lambda(\beta, \omega),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est une famille $\mathfrak{I}_1$-entière.*

Preuve Proposition 2.30.
Soit $\omega_0 \in \mathbb{R}$ fixé. Il suffit de vérifier les 2 hypothèses du corollaire dans [5].
(i) D'une part, pour tout $\omega \in \mathbb{C}$, l'opérateur $s_\Lambda(\omega, \omega_0) := \delta\omega s_{1,\Lambda}(\omega_0) + (\delta\omega)^2 s_{2,\Lambda}$ est $H_\Lambda(\omega_0)$-borné au sens des opérateurs avec borne relative nulle (cf. preuve Lemme 1.19).

D'autre part, pour tout $\beta > 0$, la famille $\{R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est $\mathfrak{B}$-analytique. Pour le voir, posons $R'_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0) := R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0) + 2\delta\omega R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0)$, $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{C}$. On a alors :

$$\lim_{h\to 0}\left\|\frac{R_\Lambda(\beta,\omega+h,\omega_0) - R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)}{h} - R'_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)\right\| = \lim_{h\to 0}|h|\|R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0)\| = 0$$

(ii) Pour tout sous-ensemble compact $\Omega \subset \mathbb{C}$, on montre maintenant que :

$$\int_0^1 \mathrm{d}\tau \sup_{\omega\in\Omega}\|R_\Lambda(\tau,\omega,\omega_0)\| < +\infty$$

Il nous faut estimer pour $\beta > 0$ les normes opérateur $\|R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0)\|$ et $\|R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0)\|$.
D'abord à partir des estimations (1.10) et (1.42), il existe une constante $c_1 > 0$ telle que :

$$\|R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0)\| \le c_1 a_\infty^2 \mathrm{e}^{\beta C_0} \tag{2.70}$$

Soit $\phi \in L^2(\Lambda)$ tel que $\|\phi\|_2 = 1$. Posons $\psi := W_\Lambda(\beta,\omega_0)\phi$.
Puisque $W_\Lambda(\beta,\omega_0)L^2(\Lambda) \to D(H_\Lambda(\omega_0)) \subset \mathcal{Q}(H_\Lambda(0))$ (cf. paragraphe 3.2, chapitre 1), l'estimation (1.28) fournit l'existence d'une constante $c_2 > 0$ telle que :

$$\|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\psi\|_2^2 \le c_2\big(\langle\psi, H_\Lambda(\omega_0)\psi\rangle + \|\psi\|_2^2\big) \tag{2.71}$$

Puis en utilisant que $\forall\,\beta > 0$, la fonction $(0,+\infty) \ni t \mapsto t\mathrm{e}^{-2\beta t}$ atteint son maximum en $t_0 := (2\beta)^{-1}$, le théorème spectral permet d'obtenir :

$$\big|\langle W_\Lambda(\beta,\omega_0)\phi, H_\Lambda(\omega_0)W_\Lambda(\beta,\omega_0)\phi\rangle\big| \le \frac{1}{2\beta e}\|\phi\|_2^2$$

Enfin en utilisant (1.42), il existe une autre constante $c_2 > 0$ telle que :

$$\|R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0)\phi\|_2^2 \le a_\infty^2\|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\psi\|_2^2 \le c_2 a_\infty^2\left(\frac{1}{\beta} + \mathrm{e}^{2\beta C_0}\right) \tag{2.72}$$

En réunissant (2.70) et (2.72), il vient l'existence d'une constante $c > 0$ telle que :

$$\forall\,\beta > 0,\quad \sup_{\omega\in\Omega}\|R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)\| \le c\Big(\sup_{\omega\in\Omega}|\delta\omega|a_\infty\sqrt{\frac{1}{\beta} + \mathrm{e}^{2\beta C_0}} + \sup_{\omega\in\Omega}|\delta\omega|^2 a_\infty^2\mathrm{e}^{\beta C_0}\Big) \tag{2.73}$$

et le majorant dans le membre de droite de (2.73) appartient à $L^1((0,1],\mathrm{d}\beta)$.

■

Remarque 2.31. Pour $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$, les opérateurs $R_{i,\Lambda}(\beta,\omega_0)$, $i \in \{1,2\}$, sont même à trace. En effet, $R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0) \in \mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$ en vertu de (1.44). Aussi $R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0) \in \mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$ en utilisant la propriété d'idéal bilatère de $\mathfrak{I}_1(L^2(\Lambda))$:

$$\|R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0)\|_{\mathfrak{I}_1} \le \|R_{1,\Lambda}(\beta/2,\omega_0)\|\|W_\Lambda(\beta/2,\omega_0)\|_{\mathfrak{I}_1} < +\infty$$

Proposition 2.32. *Pour tout $\omega \in \mathbb{C}$, il existe une constante $c > 0$ telle que :*

$$\forall\,\beta > 0,\quad \|W_\Lambda(\beta,\omega)\|_{\mathfrak{I}_2} \le c(1 + |\Im\omega|a_\infty)^2(1+\beta)|\Lambda|^{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{e}^{\beta C(\omega)}}{\beta^{\frac{3}{4}}} \tag{2.74}$$

où $C(\omega) := \max\{C_0, -\gamma_{\delta_0}(\omega)\}$, C_0 défini en (1.41) et $\gamma_{\delta_0}(\omega)$ le vertex du secteur $\mathcal{S}_{\delta_0}(\omega)$.

Preuve Proposition 2.32.
Soit $\beta > 0$. Soit $\omega \in \mathbb{C}$ et posons $\Re\omega = \omega_0$, $\Im\omega = \omega_1$. La formule de Duhamel (voir [60]) permet d'écrire :

$$W_\Lambda(\beta,\omega) = W_\Lambda(\beta,\omega_0) - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\, W_\Lambda(\beta-\tau,\omega_0) R_\Lambda(\tau,\omega,\omega_0) \tag{2.75}$$

et l'intégrale dans (2.75) est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ en vertu des estimations (1.42) et (2.73). Rappelons que l'on dispose déjà de l'estimation (1.45) sur $\|W_\Lambda(\beta,\omega_0)\|_{\mathfrak{I}_2}$. Utilisant le fait que $\mathfrak{I}_2(L^2(\Lambda))$ est un idéal bilatère, on peut ainsi déduire de (1.45) et (2.73) une estimation du type (2.74) sur $\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|_{\mathfrak{I}_2}$ via la relation (2.75).
On se propose ci-dessous d'estimer par une autre méthode la norme opérateur $\|R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)\|$.
Soient $\phi \in L^2(\Lambda)$ tel que $\|\phi\|_2 = 1$ et $\psi := W_\Lambda(\beta,\omega)\phi \in \mathcal{Q}(H_\Lambda(0))$.
En utilisant l'estimation (2.71) et le fait que $H_\Lambda(\omega_0) = \Re H_\Lambda(\omega) + \frac{\omega_1^2}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})$ au sens des formes, on montre qu'il existe une constante $c > 0$ telle que :

$$\|R_{1,\Lambda}(\beta,\omega_0)\phi\|_2^2 \le a_\infty^2 \|(i\nabla + \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))\psi\|_2^2 \le c a_\infty^2 \|\psi\|_2 \big(\|H_\Lambda(\omega)\psi\|_2 + \|\psi\|_2(\omega_1^2 a_\infty^2 + 1)\big)$$

et puisque :

$$\|R_{2,\Lambda}(\beta,\omega_0)\phi\|_2 \le \frac{1}{2} a_\infty^2 \|\psi\|_2$$

alors il existe deux autres constantes $c^{'} > 0$ et $c^{''} > 0$ telles que :

$$\|R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)\phi\|_2 \le c^{'} |\omega_1| a_\infty \|\psi\|_2^{\frac{1}{2}} \|H_\Lambda(\omega)\psi\|_2^{\frac{1}{2}} + c^{''}(1+|\omega_1|a_\infty)^2 \|\psi\|_2 \tag{2.76}$$

Il ne reste plus qu'à estimer $\|H_\Lambda(\omega)W_\Lambda(\beta,\omega)\|$. Pour cela on utilise la même méthode que celle utilisée pour estimer la norme opérateur $\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|$ dans la preuve du Lemme 2.28. Le calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir [44]) donne au sens des opérateurs bornés :

$$H_\Lambda(\omega)W_\Lambda(\beta,\omega) = \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma\cup\mathcal{C}} \mathrm{d}\xi\, \xi \mathrm{e}^{-\beta\xi}(H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}$$

où $\Gamma = \Gamma^+ \cup \Gamma^-$, $\Gamma^\pm$ et $\mathcal{C}$ sont les contours respectivement définis en (2.61) et (2.62).
En utilisant les mêmes arguments que ceux menant à (2.64), on obtient :

$$\|H_\Lambda(\omega)W_\Lambda(\beta,\omega)\| \le \frac{1}{2\pi}\left\{ c_{\epsilon_0}\int_{\Gamma^+\cup\Gamma^-} |\mathrm{d}\xi|\,|\xi| \frac{|\mathrm{e}^{-\beta\xi}|}{|\xi-\gamma_{\delta_0}(\omega)|} + \frac{\beta}{\eta}\frac{1}{\sin\frac{\epsilon_0}{2}}\int_{\mathcal{C}} |\mathrm{d}\xi|\,|\xi||\mathrm{e}^{-\beta\xi}| \right\} \tag{2.77}$$

Et en utilisant les mêmes paramétrages menant à (2.65), (2.77) devient :

$$\begin{aligned}\|H_\Lambda(\omega)W_\Lambda(\beta,\omega)\| \le \frac{\mathrm{e}^{-\beta\gamma_{\delta_0}(\omega)}}{2\pi}\Bigg\{ 2c_{\epsilon_0}\int_{\frac{\eta}{\beta}}^{+\infty} \mathrm{d}r\,(r+|\gamma_{\delta_0}(\omega)|)\frac{\mathrm{e}^{-\beta r\cos(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})}}{r} + \\ + \frac{1}{\sin\frac{\epsilon_0}{2}}\int_{\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}}^{2\pi-(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})} \mathrm{d}\phi\,\big(\frac{\eta}{\beta}+|\gamma_{\delta_0}(\omega)|\big)\mathrm{e}^{-\beta\frac{\eta}{\beta}\cos\phi}\Bigg\}\end{aligned} \tag{2.78}$$

Par le changement de variable $x := \beta r$ et vu que $\cos(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}) \ge \sin\frac{\epsilon_0}{2} > 0$, il vient :

$$\begin{aligned}&\int_{\frac{\eta}{\beta}}^{+\infty} \mathrm{d}r\,(r+|\gamma_{\delta_0}(\omega)|)\frac{\mathrm{e}^{-\beta r\cos(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})}}{r} \le c(\epsilon_0)(|\gamma_{\delta_0}(\omega)|+\beta^{-1}),\\ &\text{avec}\quad +\infty > c(\epsilon_0) := \max\left\{\int_\eta^{+\infty}\mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{e}^{-x\sin\frac{\epsilon_0}{2}}}{x}, \int_\eta^{+\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-x\sin\frac{\epsilon_0}{2}}\right\} > 0\end{aligned} \tag{2.79}$$

Quant à la seconde intégrale dans (2.78) :

$$\int_{\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2}}^{2\pi-(\theta_{\delta_0}(\omega)+\frac{\epsilon_0}{2})} \mathrm{d}\phi\,\big(\frac{\eta}{\beta}+|\gamma_{\delta_0}(\omega)|\big)\mathrm{e}^{-\beta\frac{\eta}{\beta}\cos\phi} \leq c(\eta)\big(|\gamma_{\delta_0}(\omega)|+\beta^{-1}\big), \quad c(\eta) := 2\pi(1+\eta)\mathrm{e}^{\eta} > 0 \tag{2.80}$$

En insérant (2.79) et (2.80) dans (2.78), il existe une autre constante $c(\epsilon_0) > 0$ telle que :

$$\|H_\Lambda(\omega)W_\Lambda(\beta,\omega)\| \leq c(\epsilon_0)\big(1+\beta|\gamma_{\delta_0}(\omega)|\big)\frac{\mathrm{e}^{-\beta\gamma_{\delta_0}(\omega)}}{\beta} \tag{2.81}$$

Il reste à introduire (2.81) dans (2.76) et à utiliser l'estimation (1.42) et la définition (1.36). Ainsi il existe une constante $c(\epsilon_0,\delta_0) > 0$ telle que :

$$\|R_\Lambda(\beta,\omega,\omega_0)\| \leq c(\epsilon_0)(1+|\omega_1|a_\infty)^2(1+\beta)^{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{e}^{\beta C(\omega)}}{\beta^{\frac{1}{2}}}, \quad C(\omega) := \max\{C_0, -\gamma_{\delta_0}(\omega)\} > 0$$

pour une autre constante $c(\epsilon_0,\delta_0) > 0$. Finalement en utilisant l'estimation (1.45) :

$$\begin{aligned}\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|_{\mathfrak{I}_2} &\leq \|W_\Lambda(\beta,\omega_0)\|_{\mathfrak{I}_2} + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\,\|W_\Lambda(\beta-\tau,\omega_0)\|_{\mathfrak{I}_2}\|R_\Lambda(\tau,\omega,\omega_0)\| \\ &\leq c(\epsilon_0,\delta_0)(1+|\omega_1|a_\infty)^2(1+\beta)^{\frac{1}{2}}|\Lambda|^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{e}^{C_0\beta}}{\beta^{\frac{3}{4}}} + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\,\frac{\mathrm{e}^{C_0(\beta-\tau)}}{(\beta-\tau)^{\frac{3}{4}}}\frac{\mathrm{e}^{\tau C(\omega)}}{\tau^{\frac{1}{2}}}\right)\end{aligned}$$

et en majorant le membre de droite ci-dessus, on obtient (2.74).

■

Etapes 3 et 4

Soit $\hat{\omega} \in \mathbb{C}$ fixé. Soit $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$ tel que $\xi_0 < \min\{-C_0, \gamma_{\delta_0}(\hat{\omega})\}$ avec $|\xi_0|$ suffisamment grand. Puisque $\{H_\Lambda(\omega),\ \omega \in \mathbb{C}\}$ est une famille analytique de type (A), alors il existe un voisinage $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que pour tout $\omega \in \nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$, $\xi_0 \in \rho(H_\Lambda(\omega))$.
Par la transformation de Laplace, voir (1.46) :

$$\forall\,\omega \in \nu_{\xi_0}(\hat{\omega}), \quad (H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1} = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}\tau\,\mathrm{e}^{\xi_0\tau}\mathrm{e}^{-\tau H_\Lambda(\omega)}$$

et cette intégrale est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ en vertu de l'estimation (2.60). D'une part, la fonction à valeurs opérateurs $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \ni \omega \mapsto \mathrm{e}^{-\tau H_\Lambda(\omega)}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique d'après la Proposition 2.30. D'autre part pour tout compact $\Omega \subset \nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$, l'estimation (2.74) donne l'existence de 2 constantes $c = c(\Omega) > 0$ et $C = C(\Omega) > 0$ telles que :

$$\mathrm{e}^{\xi_0\tau}\sup_{\omega\in\Omega}\|W_\Lambda(\beta,\omega)\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c|\Lambda|^{\frac{1}{2}}\sup_{\omega\in\Omega}(1+a_\infty|\Im\omega|)^2(1+\tau)\frac{\mathrm{e}^{(\xi_0+C)\tau}}{\tau^{\frac{3}{4}}} \tag{2.82}$$

Le membre de droite de (2.82) appartient à $L^1((0,+\infty),\mathrm{d}\tau)$ puisque ξ_0 est choisi suffisamment négatif. Le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale garantit que la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique sur $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})$.

Reste à étendre ce résultat pour $\xi \in \rho(H_\Lambda(\hat{\omega}))$ quelconque. La première équation résolvante donne au sens des opérateurs bornés :

$$(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi)^{-1} = (H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1} + (\xi-\xi_0)(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi)^{-1}(H_\Lambda(\hat{\omega})-\xi_0)^{-1}$$

Comme il existe un voisinage $\mathcal{V}_\xi(\hat{\omega})$ de $\hat{\omega}$ tel que $\omega \mapsto \big(H_\Lambda(\omega)-\xi\big)^{-1}$ soit $\mathfrak{B}$-analytique sur $\mathcal{V}_\xi(\hat{\omega})$, la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto (H_\Lambda(\omega)-\xi)^{-1}(H_\Lambda(\omega)-\xi_0)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique sur $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega})\cap\mathcal{V}_\xi(\hat{\omega})$ (conséquence de (i) Lemme 2.11). Il s'ensuit alors que $\omega \mapsto \big(H_\Lambda(\omega)-\xi\big)^{-1}$ est $\mathfrak{I}_2$-analytique sur $\nu_{\xi_0}(\hat{\omega}) \cap \mathcal{V}_\xi(\hat{\omega})$.

■

7 Annexe

Preuve Lemme 2.6.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Pour tout $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0)) \cap \mathbb{R}$, introduisons la fonction :

$$[E_0(\omega_0), +\infty) \ni \xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln\big(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}\big), \quad \epsilon = \pm 1$$

Soient $\alpha(\omega_0)$ tel que $-\infty < \alpha(\omega_0) \leq E_0(\omega_0)$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0)) \subseteq \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un compact. On utilisera ici la détermination principale du logarithme :

$$\forall\, u \in \mathbb{C}^*, \quad \ln(u) = \ln|u| + i\mathrm{Arg}(u), \quad \mathrm{Arg}(u) = 2\mathrm{arctan}\left(\frac{\Im u}{\Re u + |u|}\right) \in (-\pi, \pi] \tag{2.83}$$

Etant donné (2.83), une condition suffisante pour que $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, \cdot\,; \cdot\,)$ soit jointement analytique sur $K \times \mathcal{U}$, $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$ un ouvert, est : $\forall\,(z, \xi) \in K \times \mathcal{U}$, $\Re(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}) > 0$.
Dans un premier temps, on montre qu'il existe un réél $\eta_K > 0$ tel que la fonction $(z, \xi) \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$ soit jointement analytique sur le domaine :

$$K \times \Big\{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Im\xi \in \Big(-\frac{\eta_K}{\beta}, \frac{\eta_K}{\beta}\Big),\ \Re\xi \in [\alpha(\omega_0), +\infty)\Big\} \tag{2.84}$$

Clairement la fonction $(z, \xi) \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$ est analytique sur $D(\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)}) \times \{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Re\xi \in [\alpha(\omega_0), +\infty)\}$, où $D(r)$ désigne le disque ouvert centré en l'origine et de rayon $r > 0$.
Posons $\tilde{K} := K \setminus D(\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)})$. On distingue maintenant les cas $\epsilon = -1$ et $\epsilon = +1$.
Dans le cas $\epsilon = -1$, introduisons les rééls θ_m et θ_M définis respectivement par :

$$\theta_m := \min\{\arg(z),\, z \in \tilde{K}\} \quad \text{et} \quad \theta_M := \max\{\arg(z),\, z \in \tilde{K}\}$$

Puisque $\mathrm{dist}\big(\tilde{K}, [\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)}, +\infty)\big) > 0$, alors $0 < \theta_m \leq \theta_M < 2\pi$.
Posons $\eta_K := \frac{1}{2}\min\{\theta_m, 2\pi - \theta_M\} > 0$. Pour $z \in \tilde{K}$ et $\Im\xi \in \big[-\frac{\eta_K}{\beta}, \frac{\eta_K}{\beta}\big]$, on a :

$$0 < \frac{\theta_m}{2} \leq \arg(z) - \beta\Im\xi \leq \pi + \frac{\theta_M}{2} < 2\pi$$

Ainsi $\Im(1 - z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) = 0 \iff \arg(z) - \beta\Im\xi = \pi$, mais dans ce cas $\Re(1 - z\mathrm{e}^{-\beta\xi}) > 0$.
Dans le cas où $\epsilon = +1$, introduisons les rééls $\theta_m^{'}$ et $\theta_M^{'}$ définis respectivement par :

$$\theta_m^{'} := \max\{\arg(z),\, z \in \tilde{K},\, \arg(z) \geq 0\} \quad \text{et} \quad \theta_M^{'} := \min\{\arg(z),\, z \in \tilde{K},\, \arg(z) < 0\}$$

Puisque $\mathrm{dist}\big(\tilde{K}, [\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)}, +\infty)\big) > 0$, alors $-\pi < \theta_M^{'} \leq \theta_m^{'} < \pi$.
Posons $\eta_K := \frac{1}{2}\min\{\pi - \theta_m^{'}, \pi + \theta_M^{'}\} > 0$. Pour $z \in \tilde{K}$ et $\Im\xi \in \big[-\frac{\eta_K}{\beta}, \frac{\eta_K}{\beta}\big]$, on a :

$$-\pi < -\frac{\pi}{2} + \frac{\theta_M^{'}}{2} \leq \arg(z) - \beta\Im\xi \leq \frac{\pi}{2} + \frac{\theta_m^{'}}{2} < \pi$$

Ainsi $\Im(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi})=0 \iff \arg(z)-\beta\Im\xi=0$, mais dans ce cas $\Re(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi})>0$.
Il s'ensuit alors que $(z,\xi)\mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est analytique sur le domaine défini en (2.84).
Dans un deuxième temps, soit $\xi_K^{'}$ le réél vérifiant $\sup_{z\in K}|z|\mathrm{e}^{-\beta\xi_K^{'}}=1$. Il est clair que la fonction $(z,\xi)\mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est jointement analytique sur le domaine :

$$K\times\left\{\xi\in\mathbb{C}\,:\,\Re\xi>\xi_K^{'}\right\} \tag{2.85}$$

Au final, $(z,\xi)\mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ est jointement analytique sur les domaines définis par (2.84) et (2.85). Il reste à choisir par exemple $\xi_K=\max\{\xi_K^{'},E_0(\omega_0)\}+1$; ce qui achève la preuve.

■

Preuve Lemme 2.7.
Soient $\beta>0$ et $\omega_0\in\mathbb{R}$. Soit $\alpha(\omega_0)$ un réél vérifiant $-\infty<\alpha(\omega_0)<E_0(\omega_0)$.
Soit $K\subset\mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0))$ un compact et $\eta_K>0$, $\xi_K>E_0(\omega_0)$ les réels du Lemme 2.6.
Soit $\mathfrak{D}$ le domaine sur lequel $\xi\mapsto\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi):=\ln(1+\epsilon z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$ est holomorphe, voir (2.13).
Soit $\varsigma\in\left[0,\frac{\pi}{2}\right)$. Soit Γ_K le contour orienté positivement et inclus dans $\mathfrak{D}$ défini par :

$$\Gamma_K:=\left\{\Re\xi=\alpha(\omega_0),\ \Im\xi\in\left[-\frac{\eta_K}{2\beta},\frac{\eta_K}{2\beta}\right]\right\}\cup\left\{\Re\xi\in[\alpha(\omega_0),\xi_K),\ \Im\xi=\pm\frac{\eta_K}{2\beta}\right\}\cup$$
$$\cup\left\{\Re\xi\geq\xi_K,\ \arg\left(\xi-\xi_K\mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\right)=\pm\varsigma\right\}$$

Par la suite, on posera $\eta=\eta(\beta):=\frac{\eta_K}{2\beta}$ et on utilisera la détermination principale du logarithme définie en (2.83) pour les estimations.
Soit $\Re\xi=\alpha(\omega_0)$. Pour tout $\Im\xi\in[-\eta,\eta]$,

$$\forall\, z\in K,\quad |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\alpha(\omega_0)+i\Im\xi)|\leq\left(\sup_{z\in K}|z|+\pi\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)}\right)\mathrm{e}^{-\beta\alpha(\omega_0)} \tag{2.86}$$

Soit $\Im\xi=\pm\eta$. Pour tout $\Re\xi\in[\alpha(\omega_0),\xi_K)$,

$$\forall\, z\in K,\quad |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\Re\xi\pm i\eta)|\leq\left(\sup_{z\in K}|z|+\pi\mathrm{e}^{\beta\xi_K}\right)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \tag{2.87}$$

Pour $\Re\xi=\xi_K+r\cos\varsigma$ et $\Im\xi=\pm(\eta+r\sin\varsigma)$, avec $r\in(0,+\infty)$ et $\varsigma\in[0,\pi/2)$,

$$\forall\, z\in K,\quad |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\Re\xi+i\Im\xi)|\leq 2\sup_{z\in K}|z|\left(1+\frac{1}{1-\sup_{z\in K}|z|\mathrm{e}^{-\beta\xi_K}}\right)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \tag{2.88}$$

où on a utilisé que $|\arctan(x)|\leq|x|$ ainsi que pour tout $\Re\xi\geq\xi_K$, $\sup_{z\in K}|z|\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}<1$.
Les estimations (2.86), (2.87) et (2.88) donnent l'existence d'une constante $c(\beta,K)>0$ telle que pour tout $\xi\in\Gamma_K$ et pour tout $z\in K$, $|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\leq c(\beta,K)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}$, d'où (2.15).

Prouvons maintenant (2.16) en donnant seulement les principaux arguments.
Pour $n\in\mathbb{N}^*$, soit $p_n(|\xi|)=\sum_{k=0}^n a_k|\xi|^k$, $a_k\in\mathbb{C}\ \forall\, k\in\{0,n\}$, un polynôme de degré n.
Posons $\vartheta_K^{\pm}:=\xi_K\pm i\eta$ et considérons seulement la partie du contour Γ_K correspondant à $\{\Re\xi\geq\xi_K,\ \arg(\xi-\vartheta_K^{\pm})=\pm\varsigma\}$. Par le changement de variable $\xi=r\mathrm{e}^{\pm i\varsigma}+\vartheta_K^{\pm}$ et en utilisant l'estimation (2.88) ; il existe une constante numérique $c(\beta,K)>0$ telle que :

$$\int_{\{\Re\xi\geq\xi_K,\ \arg(\xi-\vartheta_K^{\pm})=\pm\varsigma\}}|\mathrm{d}\xi||p_n(|\xi|)||\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\leq c(\beta,K)\sum_{k=0}^n|a_k|\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\,(r+|\vartheta_K^{\pm}|)^k\mathrm{e}^{-\beta r\cos\varsigma}$$

Par le changement de variable $R = r + |\vartheta_K^{\pm}|$, il vient finalement :

$$\int_{\{\Re\xi \geq \xi_K,\ \arg(\xi - \vartheta_K^{\pm}) = \pm\varsigma\}} |\mathrm{d}\xi||p_n(|\xi|)||\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)|$$
$$\leq c(\beta, K)\mathrm{e}^{\beta|\vartheta_K^{\pm}|} \sum_{k=0}^{n} |a_k| \int_{|\vartheta_K^{\pm}|}^{+\infty} \mathrm{d}R\, R^k \mathrm{e}^{-(\beta\cos\varsigma)R} \leq (c^{'}(\beta, K))^n \tilde{\Gamma}(1+n) \quad (2.89)$$

où on a utilisé que pour tout entier $n \in \mathbb{N}$ et pour tout réél $\nu > 0$ (voir par ex. [1]) :

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{d}x\, x^n \mathrm{e}^{-\nu x} = \tilde{\Gamma}(1+n)\nu^{-1-n}, \quad \tilde{\Gamma}(1+n) = n!$$

■

Preuve Lemme 2.11.
(i). La preuve repose sur le fait que $\mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$, $j \in \{1, 2\}$, est un idéal bilatère, i.e. si $A \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ et $B \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$ alors $AB \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$.
Soient $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$ un ouvert et $U, V \subset \mathcal{U}$ des ouverts. Supposons que $U \ni u \mapsto A(u)$ soit $\mathfrak{B}$-analytique et que $V \ni v \mapsto B(v)$ soit $\mathfrak{I}_j$-analytique, $j \in \{1, 2\}$. Alors pour chaque $u \in U$ et $v \in V$, il existe respectivement $A^{'}(u) \in \mathfrak{B}(L^2(\Lambda))$ et $B^{'}(v) \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$ tels que :

$$\lim_{h\to 0} \left\| \frac{A(u+h) - A(u)}{h} - A^{'}(u) \right\| = 0, \quad \lim_{h\to 0} \left\| \frac{B(v+h) - B(v)}{h} - B^{'}(v) \right\|_{\mathfrak{I}_j} = 0$$

Pour $u_0 \in U \cap V$ et h choisi assez petit (de telle sorte que $u_0 + h \in U \cap V$), on a :

$$\left\| \frac{A(u_0+h)B(u_0+h) - A(u_0)B(u_0)}{h} - \big(A^{'}(u_0)B(u_0) + B^{'}(u_0)A(u_0)\big) \right\|_{\mathfrak{I}_j}$$
$$\leq \left\| \frac{A(u_0+h) - A(u_0)}{h} - A^{'}(u_0) \right\| \|B(u_0)\|_{\mathfrak{I}_j} + \left\| \frac{B(u_0+h) - B(u_0)}{h} - B^{'}(u_0) \right\|_{\mathfrak{I}_j} \|A(u_0)\| +$$
$$+ \|A(u_0+h) - A(u_0)\| \left\| \frac{B(u_0+h) - B(u_0)}{h} \right\|_{\mathfrak{I}_j}$$

Puisque $A(\cdot)$ est continue sur U au sens de la topologie $\|\cdot\|$, en prenant la limite $h \to 0$:

$$\lim_{h\to 0} \left\| \frac{A(u_0+h)B(u_0+h) - A(u_0)B(u_0)}{h} - \big(A^{'}(u_0)B(u_0) + B^{'}(u_0)A(u_0)\big) \right\|_{\mathfrak{I}_j} = 0$$

ce qui achève la preuve en notant que $\big(A^{'}(u_0)B(u_0) + B^{'}(u_0)A(u_0)\big) \in \mathfrak{I}_j(L^2(\Lambda))$.
(ii). La preuve repose sur le fait qu'un produit de deux opérateurs de Hilbert-Schmidt est un opérateur à trace. Il suffit ensuite d'utiliser la même méthode que ci-dessus.

■

Chapitre 3

Etude de quelques noyaux à volume fini et infini

Dans le chapitre précédent, on a utilisé une théorie des perturbations magnétiques "standarde" sur la résolvante dans l'expression de la pression grand-canonique (2.3) pour déduire une expression pour les susceptibilités généralisées (voir section 3, chapitre 2). Cependant la stratégie utilisée pour démontrer l'existence des limites thermodynamiques de ces quantités (sous des hypothèses supplémentaires, voir chapitre 5) nécessite d'écrire ces grandeurs en termes non plus d'opérateur (voir par ex. (2.10)) mais de leur noyau intégral correspondant. Cette opération, qui sera le sujet du chapitre 4, requiert au préalable quelques résultats techniques (régularité, estimation) sur le noyau intégral de la résolvante qui pourront être transférés sur les noyaux des opérateurs définis en (2.4) et (2.5).

Ainsi ce chapitre est consacré à l'étude du noyau intégral de la résolvante et de ses puissances entières à volume fini (et infini) introduit dans le paragraphe 4.2 du chapitre 1 (voir (1.48)) lorsque ξ_0 est choisi quelconque dans l'ensemble résolvent.

Dans une première partie, on étudie leur propriété de régularité (pour les variables d'espace) et on en donne une estimation. On verra que les hypothèses du paragraphe 3.1 du chapitre 1 peuvent être conservées dans ce cas. Dans une deuxième partie, on étudie les dérivées spatiales du noyau de la résolvante. Les méthodes qui seront utilisées imposent d'assouplir fortement les hypothèses (**H1**) et (**H3**) du paragraphe 3.1.

1 Résultats principaux

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert borné simplement connexe contenant l'origine des coordonnées de $\mathbb{R}^3$. Considérons la famille de domaines dilatés $\{\Lambda_L\}_{L\geq 1}$ définie par :

$$\Lambda_L := \big\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \ : \ \mathbf{x}/L \in \Lambda\big\}, \quad L \geq 1 \tag{3.1}$$

Lorsque $L \to \infty$, Λ_L remplit l'espace tout entier $\mathbb{R}^3$. Par convention, on posera $\Lambda_\infty \equiv \mathbb{R}^3$. Considérons l'hypothèse (**H2**) sur le champ magnétique $\mathbf{B}$ et le potentiel vecteur magnétique associé ainsi que l'hypothèse (**H3**) sur le potentiel V, voir paragraphe 3.1 chapitre 1. Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty)$, soit $H_L(\omega, V) := H_{\Lambda_L}(\omega, V)$ l'opérateur avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$ agissant dans $L^2(\Lambda_L)$ défini dans la Proposition 1.4. Soit $H_\infty(\omega, V)$ l'opérateur agissant dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ défini dans la Proposition 1.9.

Noyau intégral des puissances de la résolvante

Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soit $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ quelconque. Pour tout entier $m \in \mathbb{N}^*$, $R_L^m(\omega, V, \xi) := (H_L(\omega, V) - \xi)^{-m}$ est un opérateur intégral (cf. section 2) dans le sens :

$$\forall\, \phi \in L^2(\Lambda_L), \quad \big(R_L^m(\omega, V, \xi)\phi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, R_L^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)\phi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x} \in \Lambda_L$$

On désignera par $D_L := \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L : \mathbf{x} = \mathbf{y}\}$ la diagonale dans $\Lambda_L \times \Lambda_L$, $L \in [1, \infty]$.

Avec $\{\Lambda_L\}_{L \geq 1}$ la famille de domaines définie en (3.1) et sous les hypothèses **(H2)** et **(H3)**, on établit un premier résultat concernant les noyaux intégraux $R_L^{(m)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi)$:

Proposition 3.1. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Alors :*
(i). Pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$, l'opérateur $R_L(\omega, V, \xi)$ possède un noyau intégral :
$R_L^{(1)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi) : (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L \to \mathbb{C}$ continu.
(ii). Soit $\eta > 0$. Il existe un réél $\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot\,)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ vérifiant $\operatorname{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$ et pour tout $\delta \in [0, \delta_0]$:

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p(|\xi|) \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \tag{3.2}$$

La Proposition 3.1 peut être étendue au résultat suivant :

Corollaire 3.2. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Alors :*
(i). Pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$, l'opérateur $R_L^m(\omega, V, \xi)$ possède un noyau intégral :
$R_L^{(m)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi) : \Lambda_L \times \Lambda_L \to \mathbb{C}$ jointement continu et uniformément borné en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$.
(ii). Soit $\eta > 0$. Il existe un réél $\delta_m > 0$ et un polynôme $p_m(\cdot\,)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ vérifiant $\operatorname{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$ et pour tout $\delta \in [0, \delta_m]$:

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad |R_L^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p_m(|\xi|) \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{3.3}$$

Dérivées spatiales du noyau de la résolvante

Le deuxième résultat principal de ce chapitre concerne la première dérivée (spatiale) du noyau intégral de la résolvante à volume fini et infini. La méthode utilisée pour l'étude de cette quantité nécessite de choisir une géométrie "simple" pour Λ_L (en l'occurence un cube centré en l'origine) et d'assouplir l'hypothèse (**H3**). Voici ces nouvelles hypothèses :

Hypothèse (H1').
$\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ est le cube ouvert centré en l'origine de longueur d'arête $L \geq 1$.

Hypothèse (H3').
Avec la convention d'extension de la section 2 du chapitre 1, le potentiel V vérifie :

$$V \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3) \quad \textit{avec } \epsilon_0 > 0$$

Sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**), l'Hamiltonien $H_L(\omega, V)$ $(1 \leq L < \infty)$ défini avec conditions de Dirichlet sur les bords $\partial\Lambda_L$ est essentiellement auto-adjoint sur le domaine $\{\varphi : \varphi \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Lambda_L}),\ \varphi \restriction \partial\Lambda_L = 0\}$, voir section 3. Dans le cas $L = \infty$, l'opérateur $H_\infty(\omega, V)$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, voir section 3.

On établit le résultat suivant :

Proposition 3.3. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$.*
Soient $\mathbf{n}$ est un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$ et $j \in \{1, 2, 3\}$. Alors :
(i). Pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$, l'application :
$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)$ *est continue sur* $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.
(ii). Soit $\eta > 0$. Il existe un réél $\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ vérifiant $\operatorname{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$ *et pour tout $\delta \in [0, \delta_0]$:*

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |\mathbf{n} \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega \mathbf{a}(\mathbf{x})) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \tag{3.4}$$

Différence des noyaux de la résolvante

Pour $\kappa > 0$ un réél et pour tout $L \in [1, \infty)$, soit $\Lambda_\kappa := \{\mathbf{x} \in \Lambda_L \,:\, \operatorname{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L) \leq \kappa\}$. Sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**), voici les deux derniers résultats de ce chapitre :

Proposition 3.4. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty)$. Alors :*
(i). Pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$, l'application :
$\mathbf{x} \mapsto \{R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)\}|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ *est continue sur* $\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa$.
(ii). Soit $\eta > 0$. Il existe un réél $\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\operatorname{dist}\big(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))\big) \geq \eta$ *et pour tout $\delta \in [0, \delta_0]$:*

$$\begin{aligned} &\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq \\ &p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \left(\frac{\chi_{\Lambda_\kappa}(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} + \frac{\chi_{\Lambda_\kappa}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} + \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}(\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L) + \operatorname{dist}(\mathbf{y}, \partial\Lambda_L))} \right) \end{aligned} \tag{3.5}$$

Proposition 3.5. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty)$. Soit $j \in \{1, 2, 3\}$. Alors :*
(i). Pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$, l'application :
$\mathbf{x} \mapsto \big\{(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi))\big\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ *est continue sur* $\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa$.
(ii). Soit $\eta > 0$. Il existe un réél $\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\operatorname{dist}\big(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))\big) \geq \eta$ *et pour tout $\delta \in [0, \delta_0]$:*

$$\begin{aligned} &\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |\mathbf{n} \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega \mathbf{a}(\mathbf{x}))(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi))| \leq \\ &p(|\xi|)(1 + |\omega|)^6 \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \left(\frac{\chi_{\Lambda_\kappa}(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \frac{\chi_{\Lambda_\kappa}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}(\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L) + \operatorname{dist}(\mathbf{y}, \partial\Lambda_L))} \right) \end{aligned} \tag{3.6}$$

où $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$.

Remarque 3.6. Les estimations (3.2), (3.3) et (3.4) seront régulièrement utilisées dans les chapitres 4 et 5 pour $\xi \in \Gamma_K \subset \rho(H_L(\omega, V))$, $L \in [1, \infty]$, où Γ_K est un contour du type (2.14). Vu le paramétrage d'un tel contour, le réél $\min\{\eta_K/2\beta, |\alpha(\omega) - E_0(\omega)|\} > 0$ (avec $\eta_K > 0$ et $-\infty < \alpha(\omega) < E_0(\omega)$ les réels du Lemme 2.6) jouera le rôle du paramètre η.
A noter que les estimations proposées ne sont pas optimales dans le sens où la décroissance exponentielle disparaît lorsque $|\xi| \to +\infty$. Néanmoins elles seront suffisantes pour la suite puisque nous n'aurons pas besoin d'intégrer ces estimations sur le contour Γ_K.

2 Noyau de la résolvante à volume fini et infini

Cette section est consacrée à la preuve de la Proposition 3.1 et de son Corollaire 3.2. La stratégie utilisée pour démontrer l'estimation (ii) de la Proposition 3.1 suit de près celle utilisée dans la preuve du Lemme B.7.11 dans [101]. Quant à la preuve du Corollaire 3.2, elle repose sur les résultats de la Proposition 3.1 et les résultats des Lemmes 3.21 et 3.25, voir annexe section 5. Par souci de clarté, on énonce seulement les lemmes nécessaires à la démonstration de la Proposition 3.1 ; leur preuve se trouvent en annexe, paragraphe 2.2.

2.1 Preuve de la Proposition 3.1 et du Corollaire 3.2

Considérons les hypothèses **(H2)** et **(H3)**. Pour $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty)$, soit l'opérateur $H_L(\omega, V) := H_{\Lambda_L}(\omega, V)$ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$ défini à la Proposition 1.4 ; pour $L = \infty$, soit $H_\infty(\omega, V)$ l'opérateur défini à la Proposition 1.9. Soient $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$ (cf. Remarque 1.27) et $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ quelconque. Par la première équation résolvante, il vient au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$:

$$R_L(\omega, V, \xi) = R_L(\omega, V, \lambda) + (\xi - \lambda)R_L(\omega, V, \xi)R_L(\omega, V, \lambda) \quad L \in [1, \infty]$$

En vertu de (1.47), $\|R_L(\omega, V, \lambda)\|_{2,\infty} < +\infty$. Comme $\|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,2} \leq \frac{1}{\mathrm{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega,V))\big)}$:

$$\|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,\infty} \leq \|R_L(\omega, V, \lambda)\|_{2,\infty} + |\xi - \lambda|\|R_L(\omega, V, \lambda)\|_{2,\infty}\|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,2} < +\infty$$

Et pour tout entier $m \geq 2$, $\|R_L^m(\omega, V, \xi)\|_{2,\infty} \leq \|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,\infty}\|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,2}^{m-1} < +\infty$. Ainsi pour tout entier $m \in \mathbb{N}^*$ et pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ avec $L \in [1, \infty]$, $R_L^m(\omega, V, \xi)$ est borné de $L^2(\Lambda_L) \to L^\infty(\Lambda_L)$. En vertu du théorème de Dunford-Pettis (voir par ex. [101], [106]), $R_L^m(\omega, V, \xi)$ est un opérateur intégral dans le sens :

$$\forall\, \varphi \in L^2(\Lambda_L), \quad \big(R_L^m(\omega, V, \xi)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, R_L^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x} \in \Lambda_L \tag{3.7}$$

On s'intéresse maintenant à la régularité du noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi)$. La stratégie consiste à écrire la première équation résolvante itérée deux fois (avec λ bien choisi)

$$R_L(\omega, V, \xi) = R_L(\omega, V, \lambda) + (\xi - \lambda)R_L^2(\omega, V, \lambda) + (\xi - \lambda)^2 R_L(\omega, V, \lambda)R_L(\omega, V, \xi)R_L(\omega, V, \lambda)$$

qui entraîne, sous condition que $R_L(\omega, V, \lambda)R_L(\omega, V, \xi)R_L(\omega, V, \lambda)$ possède un noyau :

$$\begin{aligned} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) &= R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) + \\ &+ (\xi - \lambda)R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) + (\xi - \lambda)^2\big(R_L(\omega, V, \lambda)R_L(\omega, V, \xi)R_L(\omega, V, \lambda)\big)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \end{aligned} \tag{3.8}$$

Il suffit ensuite d'étudier séparément la régularité de chacun des noyaux à droite de l'égalité ci-dessus, ce qui est l'objet du Lemme 3.7 et du Lemme 3.9 ci-dessous.

Lemme 3.7. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$. Alors :*
(i). L'application $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.
(ii). Il existe des constantes $c = c(\Re\lambda, V) > 0$ et $C_1 := \frac{1}{2}\sqrt{-(\Re\lambda + C_0)} > 0$ telles que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)| \leq |R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; 0, V, \Re\lambda)| \leq c\frac{\mathrm{e}^{-C_1|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \tag{3.9}$$

Remarque 3.8. Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$. Soit $R_L^r(\omega, V, \lambda)$, avec $r > \frac{3}{4}$, défini par le calcul fonctionnel (cf. paragraphe 4.2, chapitre 1). A partir de (1.46) et de l'estimation (1.40) (avec $p = 2$ et $q = \infty$), $\|R_L^r(\omega, V, \lambda)\|_{2,\infty} < +\infty$ assurant que $R_L^r(\omega, V, \xi)$ est un opérateur intégral dans le sens (3.7) dès que $r > \frac{3}{4}$.
Par des arguments similaires à ceux utilisés dans la preuve du Lemme 3.7, on prouve :
(i) Pour tout $r \in \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{2}\right]$, $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto R_L^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)$ est continu sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.
De plus, pour tout $r \in \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{2}\right)$, il existe une constante $c = c(r, \Re\lambda, V) > 0$ telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)| \leq c \frac{\mathrm{e}^{-C_1|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{3-2r}}$$

(ii) Pour tout $r > \frac{3}{2}$, $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto R_L^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ et uniformément bornée en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$. De plus, il existe une autre constante $c = c(r, \Re\lambda, V) > 0$ telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad |R_L^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda)| \leq c\mathrm{e}^{-C_1|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad r > 3/2 \tag{3.10}$$

Lemme 3.9. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$.*
Soient $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$ (voir (1.41)) et $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ quelconque. Alors pour tout entier $m \in \mathbb{N}^*$, l'opérateur $R_L(\omega, V, \lambda) R_L^m(\omega, V, \xi) R_L(\omega, V, \lambda)$ possède un noyau intégral $K_L^m(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \lambda, \xi) : \Lambda_L \times \Lambda_L \to \mathbb{C}$ jointement continu et défini par :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \;\; K_L^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda, \xi) := \langle R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \cdot\,; \omega, V, \overline{\lambda}), R_L^m(\omega, V, \xi) R_L^{(1)}(\cdot\,, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) \rangle \tag{3.11}$$

où $\langle \cdot\,, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire sur $L^2(\Lambda_L)$.
De plus, il existe une constante $c = c(m, \Re\lambda, V) > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$:

$$|K_L^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda, \xi)| \leq c \tag{3.12}$$

***Preuve** (i) **Proposition 3.1**.*
Pour $L \in [1, \infty]$, soient $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ quelconque. A partir de la première équation résolvante itérée deux fois écrite au sens des noyaux :

$$\begin{aligned} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) = R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) + \\ + (\xi - \lambda) R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) + (\xi - \lambda)^2 K_L^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda, \xi) \end{aligned} \tag{3.13}$$

D'après (ii) Remarque 3.8 et le Lemme 3.9, les deux derniers noyaux du membre de droite de (3.13) sont jointement continus. La singularité sur la diagonale de $R_L^{(1)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \lambda)$ est donc transférée au noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi)$.

■

Remarquons que la stratégie développée ci-dessus est insuffisante pour démontrer (ii) Proposition 3.1 puisqu'elle permet seulement de déduire une estimation du type (3.2) lorsque $0 < |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \leq 1$. En effet, à partir de (3.13) et en utilisant successivement les estimations (3.9), (3.10) et (3.12), il existe une constante $c = c(\Re\lambda, V) > 0$ telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq c\mathrm{e}^{-C_1|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \big(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-1} + |\xi - \lambda|\big) + c|\xi - \lambda|^2$$

avec $C_1 > 0$ apparaissant dans le Lemme 3.7. Soit $\delta > 0$ assez petit.
Quitte à choisir λ avec $|\Re\lambda|$ suffisamment grand pour assurer que $-C_1+\delta < 0$, on obtient :

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi)| \leq c(\delta,\Re\lambda,V)\big(1+|\xi-\lambda|+|\xi-\lambda|^2\big)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad \text{lorsque } 0<|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\leq 1$$

Pour traiter le cas $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| > 1$, on utilise la stratégie suivante (voir [101] page 479). On introduit une rotation de Combes-Thomas (voir [33]) à l'opérateur $H_L(\omega,V)$ avec $L \in [1,\infty]$ pour construire un opérateur (fermé) dépendant d'un paramètre $\boldsymbol{\vartheta} \in \mathbb{R}^3$, notons-le $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$, vérifiant les trois propriétés ci-dessous :
(1) Si $\xi \in \rho(H_L(\omega,V))$ alors pour un choix adapté de $\boldsymbol{\vartheta}$, $\xi \in \rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$ également.
(2) Avec un tel choix de $\boldsymbol{\vartheta}$, le noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)$ de $R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)$ (sous condition d'existence) s'exprime en fonction du noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\xi)$ de la façon suivante :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L, \quad R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) \quad L\in[1,\infty]$$

(3) $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)$ est uniformément borné pour tout $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda_L$ avec $|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\geq 1$.
En vertu de l'identité ci-dessus, cette condition fournira la décroissance exponentielle souhaitée pour $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\xi)$ lorsque $|\mathbf{x}-\mathbf{y}|>1$.

Successivement, on construit rigoureusement l'opérateur $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ avec rotation de Combes-Thomas (cf. Lemme 3.10). On donne ensuite des conditions suffisantes de stabilité spectrale (cf. Lemme 3.11). Enfin, on démontre que la résolvante de $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est un opérateur intégral dont le noyau vérifie les propriétés (2) et (3) ci-dessus (cf. Lemme 3.13).

Lemme 3.10. *Soient $\omega\in\mathbb{R}$ et $\boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3$, avec $\vartheta := |\boldsymbol{\vartheta}|$.*
Pour $L\in[1,\infty]$, soit $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ l'opérateur agissant sur $L^2(\Lambda_L)$ (avec conditions de bords de Dirichlet pour $L\in[1,\infty)$) formellement défini par :

$$H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) := \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}H_L(\omega,V)\mathrm{e}^{-\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}} \tag{3.14}$$

Alors $\{H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V),\ \boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3\}$ est une famille analytique de type (A) (terminologie Kato). De plus, $\{H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V),\ \boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3\}$ est une famille d'opérateurs m-sectoriels de secteur :

$$\mathcal{S}(\vartheta) := \big\{\,\xi\in\mathbb{C}\ :\ |\Im\xi|\leq c_1\vartheta(\Re\xi+1/2\vartheta^2+c_2),\ \Re\xi\in[E_0(\omega)-1/2\vartheta^2,+\infty)\big\} \tag{3.15}$$

où $+\infty > c_2, c_1 > 0$, avec $c_2 > |E_0(\omega)|$ et $E_0(\omega) := \inf\sigma(H_\infty(\omega,V))$.

Lemme 3.11. *Soient $\omega\in\mathbb{R}$ et $L\in[1,\infty]$.*
(i). Soit $\lambda\in\rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\Re\lambda < \inf\sigma(H_L(\omega,V))$.
Alors pour tout $\boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3$ vérifiant $0\leq|\boldsymbol{\vartheta}| < \sqrt{2(\inf\sigma(H_L(\omega,V))-\Re\lambda)}$, $\lambda\in\rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$.
(ii). Soit $\eta>0$. Alors il existe un réel $\gamma_0(\eta)>0$ tel que pour tout $\xi\in\rho(H_L(\omega,V))$ avec $\mathrm{dist}\big(\xi,\sigma(H_L(\omega,V))\big)\geq\eta$ et $\forall\,\boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3$ vérifiant $0\leq|\boldsymbol{\vartheta}|(1+|\xi|)<\gamma_0(\eta)$, $\xi\in\rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$.

Remarque 3.12. Les assertions (i) et (ii) peuvent être regroupées en : $\forall\,\xi\in\rho(H_L(\omega,V))$, il existe un réel $c_\xi>0$ tel que $\forall\,\boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3$ vérifiant $0\leq|\boldsymbol{\vartheta}|<c_\xi$, $\xi\in\rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$.
A noter qu'on peut aussi prouver le résultat suivant. Soit $K\subset\rho(H_L(\omega,V))$, K compact. Alors il existe un réel $c_K>0$ tel que $\forall\,\boldsymbol{\vartheta}\in\mathbb{R}^3$ vérifiant $0\leq|\boldsymbol{\vartheta}|<c_K$, $K\subset\rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$.

La preuve de (ii) Proposition 3.1 s'obtient avec ce dernier résultat :

Lemme 3.13. *Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soient $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ et $\boldsymbol{\vartheta} \in \mathbb{R}^3$ avec $|\boldsymbol{\vartheta}| > 0$ suffisamment petit de telle sorte que $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_L(\omega, \boldsymbol{\vartheta}, V))$, voir Lemme 3.11. Alors :*
(i). $R_L(\omega, \boldsymbol{\vartheta}, V, \xi) := (H_L(\omega, \boldsymbol{\vartheta}, V) - \xi)^{-1}$ est un opérateur intégral de noyau défini par :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \boldsymbol{\vartheta}, V, \xi) := \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) \tag{3.16}$$

(ii). L'application $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \boldsymbol{\vartheta}, V, \xi)$ est uniformément bornée en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$ dès que $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1$. De plus, il existe une constante $c = c(\vartheta, |\xi|, V) > 0$ telle que :

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \boldsymbol{\vartheta}, V, \xi)| \leq c \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1 \tag{3.17}$$

***Preuve** (ii) **Proposition 3.1**.*
Soient $\eta > 0$ et $\gamma_0(\eta) > 0$ le réél du Lemme 3.11. Soit $\gamma_1 > 0$ un réél vérifiant $\gamma_1 < \gamma_0(\eta)$. Soient $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ avec $\mathrm{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V)\big) \geq \eta$ et $\boldsymbol{\vartheta} \in \mathbb{R}^3$ tel que $0 < \vartheta(1+|\xi|) = \gamma_1$. En vertu de (ii) Lemme 3.11, $\xi \in \rho(H_L(\omega, \boldsymbol{\vartheta}, V)$ également.
Considérons d'abord le cas $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1$.
A partir de (ii) Lemme 3.13 et de (3.16), il existe une constante $c(\vartheta, |\xi|, V) > 0$ telle que :

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq c(\vartheta, |\xi|, V)\mathrm{e}^{-\vartheta|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1$$

Compte-tenu de l'expression explicite de $c(\vartheta, |\xi|, V)$ dans (3.43) (voir preuve Lemme 3.13), cette constante peut être remplacée par un polynôme $p(|\xi|)$:

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p(|\xi|)\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1 \tag{3.18}$$

Considérons ensuite le cas $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \leq 1$.
A partir de la première équation résolvante itérée deux fois au sens des noyaux (3.8), en utilisant les estimations (3.9) et (3.12), il existe un autre polynôme $q(|\xi|)$ tel que :

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq q(|\xi|)\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}, \quad 1 \geq |\mathbf{x} - \mathbf{y}| > 0 \tag{3.19}$$

Il reste à trouver une estimation commune à (3.18) et (3.19). Pour cela, utilisons que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \text{ t.q. } |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \leq 1, \quad \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \leq \mathrm{e}^{\frac{\gamma_1}{2}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

et ensuite que :

$$\forall\, t > 0,\ \forall\, \mu > 0,\ \forall\, \nu > 0, \quad t^\mu \mathrm{e}^{-\nu t} = t^\mu \mathrm{e}^{-\frac{\nu t}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{\nu t}{2}} \leq (2\mu/\nu e)^\mu \mathrm{e}^{-\frac{\nu t}{2}} \tag{3.20}$$

ce qui assure que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \text{ t.q. } |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 1, \quad \mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \leq \frac{8}{\gamma_1 e}(1 + |\xi|)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{4(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

Au final, il suffit de regrouper ces deux dernières estimations et de poser $\delta_0 := \gamma_1/4 > 0$.

■

Preuve Corollaire 3.1.
(i) Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soit $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ quelconque.
Considérons pour commencer le cas $m = 2$. Le noyau intégral de $R_L^2(\omega, V, \xi)$ peut s'écrire :

$$R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi) R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$$

D'une part, en vertu de (i) Proposition 3.1, $R_L^{(1)}(\cdot\,, \mathbf{z}; \omega, V, \xi)$ et $R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \cdot\,; \omega, V, \xi)$ sont continus sur $\Lambda_L \setminus \{\mathbf{z}\}$ pour presque tout $\mathbf{z} \in \Lambda_L$. D'autre part, en vertu de (ii) Proposition 3.1, il existe un réél $c = c_\xi > 0$ suffisamment petit et une constante $c(|\xi|) > 0$ telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq c(|\xi|) \frac{\mathrm{e}^{-c|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

Le Lemme 3.21 en section 5 assure que $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$. Puis avec l'estimation (3.71) du Lemme 3.25 (cas $\alpha_1 = 1 = \alpha_2$), $R_L^{(2)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \xi)$ est uniformément borné en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$.
(ii) Pour $\eta > 0$ fixé, soit $\delta_0 > 0$ le réél de (ii) Proposition 3.1. Il existe un polynôme $p(\cdot)$ tel que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ avec $\mathrm{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$:

$$|R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p(|\xi|) \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{z}|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z} - \mathbf{y}|}$$

Il reste à utiliser l'estimation (3.71) du Lemme 3.25 (cas $\alpha_1 = 1 = \alpha_2$) pour obtenir (3.3).

Pour $m \geq 3$ entier, il suffit de répéter les arguments utilisés ci-dessus à partir de :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad R_L^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_L^{(m-1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi) R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)$$

■

2.2 Annexe

Preuve Lemme 3.7.
Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $L \in [1, \infty]$. Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega, V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0$, voir (1.41).
(i). A partir de l'estimation (1.43) sur le noyau du semi-groupe, il existe une constante $c > 0$ telle que :

$$\forall\, t \in (0, +\infty),\ \forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad |\mathrm{e}^{\lambda t} G_L(\mathbf{x}, \mathbf{y}; t, \omega, V)| \leq c \mathrm{e}^{(\Re\lambda + C_0)t} t^{-\frac{3}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4t}} \tag{3.21}$$

Le majorant dans (3.21) est intégrable en $t \sim +\infty$ quand $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq 0$ et intégrable en $t \sim 0$ quand $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| > 0$. Ainsi pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$ tels que $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq d > 0$:

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, |\mathrm{e}^{\lambda t} G_L(\mathbf{x}, \mathbf{y}; t, \omega, V)| \leq c \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{(\Re\lambda + C_0)t} t^{-\frac{3}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{d^2}{4t}} < +\infty \tag{3.22}$$

Utilisant maintenant la transformation de Laplace (1.46) au sens des noyaux, il s'ensuit :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda) = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\lambda t} G_L(\mathbf{x}, \mathbf{y}; t, \omega, V) \tag{3.23}$$

Par l'intermédiaire de l'estimation (3.22), le théorème de continuité sous le signe intégrale assure que $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\lambda)$ est continu en dehors de la diagonale D_L.
(ii). Le majorant dans (3.21) permet d'obtenir :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L,\quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)|\leq c\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0)t}t^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4t}}$$

Avec le changement de variable $u:=\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4t}$:

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0)t}t^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4t}}=\frac{2}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0)\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4u}}u^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{u}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{3u}{4}},\quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Puisque $(0,+\infty)\ni u\mapsto \mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0)\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4u}}\mathrm{e}^{-\frac{u}{4}}$ atteint en $u_0:=\sqrt{-(\Re\lambda+C_0)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|>0$ son maximum, il vient :

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0)t}t^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4t}}\leq 2\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{-(\Re\lambda+C_0)}}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}u\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{3u}{4}}}{\sqrt{u}}$$

L'intégrale dans le membre de droite étant convergente, le Lemme 3.7 est prouvé.

■

Preuve Lemme 3.9.
Pour la première partie, il suffit de vérifier les hypothèses du lemme B.7.8. dans [101].
On rappelle (voir par ex. [24]) qu'un opérateur de Carleman est un opérateur borné sur $L^2(\Lambda_L)$ ayant un noyau $N(\cdot\,,\cdot\,)$ de Carleman, i.e. vérifiant $\operatorname{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Lambda_L}\|N(\mathbf{x},\cdot\,)\|_2<+\infty$.
(1). A partir de l'estimation (3.9), $R_L(\omega,V,\lambda)$ est clairement un opérateur de Carleman :

$$\begin{aligned}&\operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Lambda_L}\left(\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\,|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)|^2\right)^{\frac{1}{2}}\\&\leq c(\Re\lambda,V)\operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\Lambda_L}\left(\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\frac{\mathrm{e}^{-2C_1|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}\right)^{\frac{1}{2}}=c(\Re\lambda,V)\left(4\pi\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\,\mathrm{e}^{-2C_1r}\right)^{\frac{1}{2}}<+\infty\end{aligned}\tag{3.24}$$

où on a utilisé les coordonnées sphériques usuelles dans la dernière égalité.
(2). Pour tout $\phi\in L^2(\Lambda_L)$, $\Lambda_L\ni\mathbf{x}\mapsto\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)\phi(\mathbf{y})$ est continue.
Pour le voir, il suffit d'utiliser le Lemme 3.22 compte-tenu de la Remarque 3.24 en prenant $N_1(\cdot\,,\cdot\,)\equiv R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\lambda)$ vérifiant l'estimation (3.9), $V\equiv\phi\in L^2(\Lambda_L)$ et $N_2(\cdot\,,\cdot\,)\equiv 1$.
(3). $\Lambda_L\ni\mathbf{x}\mapsto\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\,|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)|^2$ est continue.
Pour le voir, il suffit d'utiliser le Lemme 3.21 en prenant $N_1(\cdot\,,\cdot\,)\equiv R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\lambda)$ et $N_2(\cdot\,,\cdot\,)\equiv\overline{R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\lambda)}=R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\overline{\lambda})$ vérifiant tout deux l'estimation (3.9).
Par les mêmes arguments, $R_L(\omega,V,\overline{\lambda})$ est un opérateur de Carleman et son noyau intégral $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,V,\overline{\lambda})$ vérifie les propriétés **(2)** et **(3)** ci-dessus.
D'après lemme B.7.8. dans [101], $R_L(\omega,V,\lambda)R_L^m(\omega,V,\xi)R_L(\omega,V,\lambda)$ est un opérateur de Carleman dont le noyau intégral est jointement continu sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ et est défini par (3.11).

Maintenant prenons $\phi, \psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$. Comme :

$$\langle \phi, R_L(\omega, V, \lambda) R_L^m(\omega, V, \xi) R_L(\omega, V, \lambda)\psi\rangle = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \overline{\phi(\mathbf{x})} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, K_L^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \lambda, \xi)\psi(\mathbf{y})$$

il s'ensuit à partir des "estimations de Sobolev" (i.e. estimations (1.47)) :

$$\begin{aligned}&|\langle \phi, R_L(\omega, V, \lambda) R_L^m(\omega, V, \xi) R_L(\omega, V, \lambda)\psi\rangle| \leq \\ &\qquad \|\phi\|_1 \|\psi\|_1 \|R_L(\omega, V, \lambda)\|_{2,\infty} \|R_L(\omega, V, \xi)\|_{2,2}^m \|R_L(\omega, V, \lambda)\|_{1,2} < +\infty \quad (3.25)\end{aligned}$$

Il reste à prendre pour ϕ et ψ des approximations de l'identité centrées au points $\mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y}_0$ respectivement. Ainsi il existe une constante $c = c_m(\Re\lambda, V) > 0$ tel que :

$$\|R_L(\omega, V, \lambda) R_L^m(\omega, V, \xi) R_L(\omega, V, \lambda)\|_{1,\infty} = \operatorname{ess} \sup_{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0 \in \Lambda_L} |K_L^m(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0; \omega, V, \lambda, \xi)| \leq c$$

Par continuité jointe de $K_L^m(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \lambda, \xi)$, le majorant essentiel est en fait le sup.

■

Remarque 3.14. Dans la preuve, les propriétés **(2)** et **(3)** vérifiées par $R_L^{(1)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, V, \lambda)$ disent simplement que l'application $\mathbf{x} \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \cdot\,; \omega, V, \lambda)$ est continue de Λ_L dans $L^2(\Lambda_L)$. En effet, (1) montre que $\mathbf{x} \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \cdot\,; \omega, V, \lambda)$ est continue par rapport à la topologie faible de $L^2(\Lambda_L)$; (2) implique que $\mathbf{x} \mapsto \|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \cdot\,; \omega, V, \lambda)\|_2$ est continue.

Preuve Lemme 3.10.
On commence par donner un sens rigoureux à l'opérateur formellement défini en (3.14). On limite la démonstration au cas où $1 \leq L < \infty$. Le cas $L = \infty$ se déduira par des arguments similaires. On utilise ci-dessous les notations utilisées dans le paragraphe 3.2, chapitre 1. Soit $\phi \in \mathcal{C}^\infty(\Lambda_L)$ tel que ϕ, $\nabla\phi$ et $\Delta\phi$ soient bornés. Pour $\omega \in \mathbb{R}$, soit $u \in D(H_L(\omega, V)) \subset \mathcal{Q}(H_L(\omega, V)) = \mathcal{H}_0^1(\Lambda_L)$. Il existe alors une suite $\{u_n\}_{n\geq 1} \subset \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ qui approxime u dans la norme $\|\cdot\|_{+1}$ (voir section 2, chapitre 1). En utilisant la formule de Leibniz, on montre que la multiplication par ϕ est un opérateur borné sur $\mathcal{H}_0^1(\Lambda_L)$. Alors $\{\phi u_n\}_{n\geq 1}$ approxime ϕu dans $\mathcal{H}_0^1(\Lambda_L)$ et ainsi $\phi u \in \mathcal{Q}(H_L(\omega, V))$. Pour $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$, il vient alors :

$$\begin{aligned}h_L^{\omega,V}(\phi u, v) = \frac{1}{2}\langle(-i\nabla - \omega\mathbf{a})(\phi u), (-i\nabla - \omega\mathbf{a})v\rangle + \\ + \langle (V^+)^{\frac{1}{2}}(\phi u), (V^+)^{\frac{1}{2}} v\rangle - \langle (V^-)^{\frac{1}{2}}(\phi u), (V^-)^{\frac{1}{2}} v\rangle\end{aligned}$$

Puis par des intégrations par parties, on obtient :

$$\begin{aligned}h_L^{\omega,V}(\phi u, v) = \frac{1}{2}\langle(-i\nabla - \omega\mathbf{a})u, (-i\nabla - \omega\mathbf{a})(\phi v)\rangle + \langle (V^+)^{\frac{1}{2}} u, (V^+)^{\frac{1}{2}}(\phi v)\rangle + \\ - \langle (V^-)^{\frac{1}{2}} u, (V^-)^{\frac{1}{2}}(\phi v)\rangle - \langle (i\nabla\phi)\cdot(-i\nabla - \omega\mathbf{a})u, v\rangle - \frac{1}{2}\langle(\Delta\phi)u, v\rangle\end{aligned}$$

C'est-à-dire :

$$h_L^{\omega,V}(\phi u, v) = h_L^{\omega,V}(u, \phi v) - \langle (i\nabla\phi)\cdot(-i\nabla - \omega\mathbf{a})u, v\rangle - \frac{1}{2}\langle(\Delta\phi)u, v\rangle \quad (3.26)$$

Puisque $h_L^{\omega,V}(u,\cdot)$ est une forme linéaire bornée et ϕ est une fonction bornée, le premier terme à droite de l'égalité dans (3.26) est une forme linéaire bornée de $v \in L^2(\Lambda_L)$. Puisque $(-i\partial_{x_j} - \omega a_j)u \in L^2(\Lambda_L)$ et puisque $\nabla\phi$ et $\Delta\phi$ sont bornées, le deuxième et le troisième terme à droite de l'égalité (3.26) donnent également des formes linéaires bornées de $v \in L^2(\Lambda_L)$. Ainsi on conclut que $\phi u \in D(H_L(\omega,V))$ et :

$$H_L(\omega,V)(\phi u) = \phi H_L(\omega,V)u - i(\nabla\phi)\cdot(-i\nabla - \omega\mathbf{a})u - \frac{1}{2}(\Delta\phi)u \tag{3.27}$$

A partir de (3.14) et en vertu de (3.27), soit l'opérateur $n_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta})$ défini sur $\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$ par :

$$n_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta}) := -i\boldsymbol{\vartheta}\cdot(i\nabla + \omega\mathbf{a}) - \frac{1}{2}\boldsymbol{\vartheta}^2 \tag{3.28}$$

Soit $\varphi \in D(H_L(\omega,V)) \subset \mathcal{Q}(H_L(\omega,V))$ tel que $\|\varphi\|_2 = 1$. En vertu de (1.29), pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\epsilon^{'} \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\|n_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta})\varphi\|_2 \leq \epsilon\vartheta\|H_L(\omega,V)\varphi\|_2 + \vartheta(\epsilon^{'} + \vartheta/2) \tag{3.29}$$

Ainsi, l'opérateur $n_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta})$ est $H_L(\omega,V)$-borné avec borne relative nulle. Le théorème IV.1.1 dans [60] assure que $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) = H_L(\omega,V) + n_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta}) = \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a} + i\boldsymbol{\vartheta})^2 + V$ est fermé sur le domaine $D(H_L(\omega,V))$ indépendant de $\boldsymbol{\vartheta}$. Comme de plus $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\phi$, avec $\phi \in D(H_L(\omega,V))$, est analytique, on conclut que $\{H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V),\ \boldsymbol{\vartheta} \in \mathbb{R}^3\}$ est une famille analytique de type (A).
Pour terminer la preuve, il reste à prouver que $\{H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V),\ \boldsymbol{\vartheta} \in \mathbb{R}^3\}$ est une famille d'opérateurs m-sectoriels. Soit $\phi \in D(H_L(\omega,V)) \subset \mathcal{Q}(H_L(\omega,V))$ tel que $\|\phi\|_2 = 1$. Alors :

$$\Re\langle\phi, H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\phi\rangle = \langle\phi, H_L(\omega,V)\phi\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi,\boldsymbol{\vartheta}^2\phi\rangle \geq \langle\phi, H_L(\omega,V)\phi\rangle - \frac{1}{2}\vartheta^2 \tag{3.30}$$

et d'autre part, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz suivi de l'estimation (1.28), il existe deux constantes $c > 0$ et $c^{'} > |E_0(\omega)| > 0$ telles que :

$$|\Im\langle\phi, H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\phi\rangle| = |\langle\phi,\boldsymbol{\vartheta}\cdot(i\nabla + \omega\mathbf{a})\phi\rangle| \leq c\vartheta(\langle\phi, H_L(\omega,V)\phi\rangle + c^{'}) \tag{3.31}$$

Soit $\Theta(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$ l'image numérique de $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$. A partir de (3.30) et (3.31), on obtient que $\Theta(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$ est inclus dans le secteur $\mathcal{S}(\vartheta)$ défini par (3.15).
L'opérateur $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ étant m-sectoriel (i.e. quasi-m-accretif et sectoriel), l'extérieur du secteur $\mathcal{S}(\vartheta)$ est un sous-ensemble de l'ensemble résolvent $\rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$.

■

Preuve Lemme 3.11.
(i). Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\Re\lambda < \inf\sigma(H_L(\omega,V))$, avec $1 \leq L \leq \infty$.
La condition $0 \leq \vartheta < \sqrt{2(\inf\sigma(H_L(\omega,V)) - \Re\lambda)}$ est une conséquence de (3.30).
(ii). Soit $\xi \in \rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\mathrm{dist}\big(\xi,\sigma(H_L(\omega,V))\big) \geq \eta > 0$. Considérons l'inégalité (3.29) et fixons $\epsilon > 0$; en conséquence $\epsilon^{'} = \epsilon^{'}(\epsilon)$ est un nombre réél fixé. D'après le théorème IV.3.17 dans [60], une condition suffisante assurant que $\xi \in \rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$ est :

$$\vartheta(2|\epsilon^{'}| + \vartheta)\|R_L(\omega,V,\xi)\| + \vartheta\epsilon\|H_L(\omega,V)R_L(\omega,V,\xi)\| < 1 \quad \text{avec } (\vartheta\epsilon) < 1$$

Sans perte de généralité, supposons que $\vartheta < 1$. Alors la condition ci-dessus est a fortiori satisfaite lorsque :

$$\vartheta(2|\epsilon^{'}|+1)\|R_L(\omega,V,\xi)\| + \vartheta\epsilon[1+|\xi|\|R_L(\omega,V,\xi)\|] < 1 \quad \text{avec } (\vartheta\epsilon) < 1 \tag{3.32}$$

En maximisant le membre de gauche de (3.32) avec l'estimation $\|R_L(\omega,V,\xi)\| \leq k_0$, où $k_0 := \max\{1,\eta^{-1}\}$, on a :

$$\vartheta(2|\epsilon^{'}|+1)\|R_L(\omega,V,\xi)\| + \vartheta\epsilon[1+|\xi|\|R_L(\omega,V,\xi)\|] \leq k_0\vartheta(1+|\xi|)[1+2|\epsilon^{'}|+\epsilon] < 1$$

et par conséquent (3.32) est a fortiori satisfaite lorsque :

$$\vartheta < \frac{\gamma_0}{1+|\xi|} \quad \text{avec} \quad 1 > \gamma_0 := \frac{1}{k_0}\frac{1}{1+2|\epsilon'|+\epsilon} > 0 \tag{3.33}$$

■

Preuve Lemme 3.13.
L'opérateur $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ étant m-sectoriel, d'après le théorème X.52 dans [91], il est le générateur d'un semi-groupe fortement continu quasi borné (terminologie Kato) :

$$\left\{W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) := \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)} : L^2(\Lambda_L) \to L^2(\Lambda_L)\right\}_{\beta\geq 0} \quad 1 \leq L \leq \infty$$

Pour tout $\beta > 0$, soit $G_L(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,V)$ le noyau intégral de $W_L(\beta,\omega,V) := \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega,V)}$ (cf. paragraphe 4.1, chapitre 1). Considérons la fonction continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ définie par :

$$\forall\,(\beta,\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathbb{R}_+^* \times \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) := \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V) \tag{3.34}$$

On peut vérifier que $G_L(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est le noyau du semi-groupe $W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ de générateur $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$. Soient $\phi \in D(H_L(\omega,V))$ et $\psi := \mathrm{e}^{-\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}\phi \in D(H_L(\omega,V))$ (voir preuve Lemme 3.10). Il suffit d'utiliser que :

$$\begin{aligned} H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\phi = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}H_L(\omega,V)\psi &= \lim_{\beta\to 0}\frac{1}{\beta}[\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}\psi - \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}W_L(\beta,\omega,V)\psi] \\ &= \lim_{\beta\to 0}\frac{1}{\beta}\left[\phi - \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V)\phi(\mathbf{y})\right] \end{aligned}$$

A partir de l'expression de son noyau (3.34), montrons que $W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est borné de $L^p(\Lambda_L) \to L^q(\Lambda_L)$ avec $1 \leq p \leq q \leq \infty$, et que $W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est un semi-groupe fortement continu sur $L^q(\Lambda_L)$ avec $1 \leq q < \infty$ (voir par ex. [38], [53] pour d'autres propriétés).

En vertu de (1.43), le noyau (3.34) est borné par $\hat{G}_\infty(\mathbf{x};\beta,0,\boldsymbol{\vartheta},V) := c\beta^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{C_0\beta}\mathrm{e}^{\vartheta|\mathbf{x}|-\frac{\mathbf{x}^2}{4\beta}}$; il vient alors par l'inégalité de Young :

$$\|W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\|_{p,q} \leq \|\hat{G}_\infty(\cdot\,;\beta,0,\boldsymbol{\vartheta},V)\|_r \quad \text{avec } r^{-1} = 1 + q^{-1} - p^{-1}$$

Etant donné que $\mathrm{e}^{\vartheta|\mathbf{x}|-\frac{\mathbf{x}^2}{4\beta}} \leq \mathrm{e}^{2\vartheta^2\beta}\mathrm{e}^{-\frac{\mathbf{x}^2}{8\beta}}$ puisque $(0,+\infty) \ni t \mapsto \mathrm{e}^{\vartheta t-\frac{t^2}{8\beta}}$ atteint son maximum en $t_0 := 4\beta\vartheta$; il s'ensuit :

$$\|W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\|_{p,q} \leq c\mathrm{e}^{(2\vartheta^2+C_0)\beta}\beta^{-(1-r^{-1})\frac{3}{2}}, \quad 1 - r^{-1} = p^{-1} - q^{-1} \tag{3.35}$$

pour une autre constante $c > 0$ dépendant de V. En particulier :

$$\|W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)\|_{1,\infty} = \operatorname{ess}\sup_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\Lambda_L\times\Lambda_L} |G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)| \leq c\mathrm{e}^{(2\vartheta^2+C_0)\beta}\beta^{-\frac{3}{2}} \tag{3.36}$$

Enfin, comme pour tout $z \in \mathbb{C}$, $|\mathrm{e}^z - 1| \leq |z|\mathrm{e}^{|z|}$, on a :

$$\begin{aligned}|G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) - G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V)| \leq \\ c|\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} - 1|\mathrm{e}^{C_0\beta}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4\beta}} \leq c\vartheta|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\mathrm{e}^{C_0\beta}\mathrm{e}^{\vartheta|\mathbf{x}-\mathbf{y}|-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4\beta}}\end{aligned}$$

et par conséquent, en utilisant encore une fois l'inégalité de Young :

$$\|W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V) - W_L(\beta,\omega,V)\|_{q,q} \leq c\vartheta\mathrm{e}^{(2\vartheta^2+C_0)\beta}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{x}\,|\mathbf{x}|\mathrm{e}^{-\frac{\mathbf{x}^2}{8\beta}} \leq c(\vartheta)\mathrm{e}^{(2\vartheta^2+C_0)\beta}\beta^{\frac{1}{2}}$$

pour une constante $c(\vartheta) > 0$. Puisque la borne supérieure tend vers 0 quand $\beta \to 0$, $W_L(\beta,\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est un semi-groupe fortement continu.

Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\Re\lambda < -C_0 - 4\vartheta^2 < \inf\sigma(H_\infty(\omega,V)) - \vartheta^2/2$ avec $|\Re\lambda|$ suffisamment grand. Cela assure que $\lambda \in \rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V))$ (cf. (i) Lemme 3.11). A partir de la transformation de Laplace, introduisons $R_L^m(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda) := (H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)-\lambda)^{-m}$, $m \in \mathbb{N}^*$:

$$R_L^m(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda) = \frac{1}{\Gamma(m)}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,t^{m-1}\mathrm{e}^{\lambda t}W_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V), \quad m \in \mathbb{N}^* \tag{3.37}$$

Utilisant (3.35) (avec $p = 2$ et $q = \infty$), $R_L^m(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)$ est un opérateur intégral de noyau :

$$R_L^{(m)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}R_L^{(m)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x},\mathbf{y} \in \Lambda_L \tag{3.38}$$

En vertu de (i) Lemme 3.7, $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)$ est continu sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$ et il existe une constante $c = c(\Re\lambda,V) > 0$ telle que :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)| \leq c\frac{\mathrm{e}^{-(C_1-\vartheta)|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}, \quad C_1-\vartheta > 0 \tag{3.39}$$

où $C_1 := \frac{1}{2}\sqrt{-(\Re\lambda + C_0)} > 0$ (λ a été choisi de telle sorte que $C_1 - \vartheta > 0$).
D'autre part, en vertu de (2) Remarque 3.8, $R_L^{(2)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)$ est continu sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ et il existe une autre constante $c = c(\Re\lambda,V) > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x},\mathbf{y} \in \Lambda_L$:

$$|R_L^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)| \leq c \tag{3.40}$$

Soit $\xi \in \rho(H_L(\omega)) \cap \rho(H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta}))$ (l'intersection est non vide puisque $H_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V)$ est m-sectoriel). Utilisant les résultats ci-dessus, et en réadaptant la preuve du Lemme 3.9, l'opérateur $R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)$ a un noyau continu défini par :

$$\begin{aligned}K_L^1(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda,\xi) &= \langle \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\cdot\,)}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\cdot\,;\omega,V,\overline{\lambda}), R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\cdot\,-\mathbf{y})}R_L^{(1)}(\cdot\,,\mathbf{y};\omega,V,\lambda)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}K_L^1(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda,\xi)\end{aligned} \tag{3.41}$$

où on a utilisé formellement que $R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}R_L(\omega,V,\xi)\mathrm{e}^{-\boldsymbol{\vartheta}\cdot\mathbf{x}}$. A partir de (3.35) et utilisant (3.37), il existe une autre constante $c=c(\Re\lambda,V)>0$ telle que :

$$\max\big(\|R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)\|_{1,2},\|R_L(\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda)\|_{2,\infty}\big)\leq c\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{(\Re\lambda+C_0+4\vartheta^2)t}t^{-\frac{3}{4}}\leq\frac{c}{(C_1^2-\vartheta^2)^{\frac{1}{4}}}$$

ce qui implique (voir méthode dans la preuve Lemme 3.9) l'estimation :

$$\sup_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\Lambda_L\times\Lambda_L}|K_L^1(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\lambda,\xi)|\leq\frac{c}{\sqrt{C_1^2-\vartheta^2}}\tag{3.42}$$

pour une autre constante $c=c(\Re\lambda,V)>0$.

On a maintenant tous les éléments pour prouver (i) et (ii).
(i). A partir de la première équation résolvante itérée deux fois écrite au sens des noyaux, et en utilisant les expressions (3.38) et (3.41), on obtient directement :

$$R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi)\quad\mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

(ii). A partir des estimations (3.39) (avec la condition $|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\geq 1$), (3.40) ainsi que (3.42) :

$$|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\boldsymbol{\vartheta},V,\xi)|\leq c(\vartheta,|\xi|,V),\quad c(\vartheta,|\xi|,V):=c(V)\Big(1+|\xi-\lambda|+\frac{|\xi-\lambda|^2}{\sqrt{C_1^2-\vartheta^2}}\Big)\tag{3.43}$$

■

3 Dérivées spatiales du noyau de la résolvante

Rappelons pour commencer quelques résultats relatifs aux dérivées spatiales du noyau intégral du semi-groupe de générateur $H_{\Lambda_L}(\omega,0)=H_L(\omega,0)$ avec $L\in[1,\infty]$.

Pour tout $\omega\in\mathbb{R}$, l'opérateur $H_\infty(\omega,0):=\frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2$ défini par une extension de Firedrichs (cf. preuve Proposition 1.9) est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.
On considère dans tout cette section un potentiel $V\in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0>0$, voir hypothèse (**H3'**) en début de chapitre. Puisque V est $H_\infty(\omega,0)$-borné au sens des opérateurs avec borne relative nulle (théorème XIII.96 dans [93]), le théorème de Kato-Rellich (théorème X.12 dans [91]) assure que $H_\infty(\omega,V):=\frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2+V$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Par commodité, on notera sa fermeture par le même symbole.

Soit $\{W_\infty(\beta,\omega,V)\}_{\beta\geq 0}$ le semi-groupe de générateur $H_\infty(\omega,V)$; pour ses propriétés, voir paragraphe 4.1 du chapitre 1. Pour tout $\beta>0$ et $\omega\in\mathbb{R}$, il possède un noyau intégral $G_\infty(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,V):\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ jointement continu et vérifiant l'estimation (1.43).
Ce noyau est connu explicitement dans les deux cas suivants :
(1) Lorsque $\omega=0$ et $V=0$. Le noyau de la chaleur $G_\infty(\cdot\,,\cdot\,;\beta,0,0)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ en ses deux variables et est défini par (voir par ex. [36]) :

$$G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,0,0):=\frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}}\exp\Big(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{2\beta}\Big)\quad(\mathbf{x},\mathbf{y},\beta)\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3\times(0,+\infty)\tag{3.44}$$

(2) Lorsque $\omega \in \mathbb{R}$ et $V = 0$. $G_\infty(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,0)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ en ses deux variables. Avec $\phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \mathbf{x}\cdot\mathbf{a}(\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{e}_3}{2}\cdot(\mathbf{y}\wedge\mathbf{x})$ désignant la phase magnétique, il est défini par (voir [29]) :

$$G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0) := \frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}}\frac{\omega\beta/2}{\sinh(\omega\beta/2)}\exp\big(i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})\big)\cdot$$
$$\cdot\exp\left\{-\frac{1}{2\beta}\frac{\omega\beta/2}{\tanh(\omega\beta/2)}\big(\mathbf{e}_3\wedge(\mathbf{x}-\mathbf{y})\big)^2-\frac{1}{2\beta}\big(\mathbf{e}_3\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})\big)^2\right\}\quad (\mathbf{x},\mathbf{y},\beta)\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3\times(0,+\infty)$$

Voici une estimation établie dans [16] sur la première dérivée du noyau $G_\infty(\cdot\,,\mathbf{y};\beta,\omega,0)$. En désignant par $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$, il existe une constante $c>0$ telle que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y},\beta)\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3\times(0,+\infty)$:

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0)| \le c(1+|\omega|)\frac{(1+\beta)}{\sqrt{\beta}}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};2\beta,0,0) \tag{3.45}$$

Considérons maintenant le cas $L\in[1,\infty)$. Etant donné la géométrie choisie pour Λ_L, i.e. $\Lambda_L := (-L/2,L/2)^3$, $H_L(0,0) := -\frac{1}{2}\Delta$ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_L(0,0)) = \{\varphi\,:\,\varphi\in\mathcal{C}^\infty(\overline{\Lambda_L}),\ \varphi\restriction\partial\Lambda_L=0\}$ (voir proposition XIII.15.1 dans [93]). Idem pour l'opérateur $H_L(\omega,0)=\frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2$ en vertu de la Remarque 1.7. En désignant par le même symbole la restriction de $V\in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ ($\epsilon_0>0$) à Λ_L, $H_L(\omega,V)=\frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2+V$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_L(0,0))$. Par la suite, on notera sa fermeture par le même symbole.

Soit $\{W_L(\beta,\omega,V)\}_{\beta\ge0}$ le semi-groupe de générateur $H_L(\omega,V)$; pour ses propriétés, voir paragraphe 4.1 du chapitre 1. Pour tout $\beta>0$ et $\omega\in\mathbb{R}$, il possède un noyau intégral $G_L(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,V):\Lambda_L\times\Lambda_L\to\mathbb{C}$ jointement continu et vérifiant l'estimation (1.43).
Ce noyau est connu explicitement seulement lorsque $\omega=0$ et $V=0$. Dans ce cas précis, $G_L(\cdot\,,\cdot\,;\beta,0,0)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ en ses deux variables et est défini par (voir [4]) :

$$G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,0,0)=\frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}}\prod_{j=1}^{3}\left\{\sum_{m\in\mathbb{Z}}\left[\exp\left(-\frac{(x_j-y_j+2mL)^2}{2\beta}\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.-\exp\left(-\frac{(x_j+y_j-(2m+1)L)^2}{2\beta}\right)\right]\right\}$$

En présence du champ magnétique, $G_L(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,0)$ est également de classe $\mathcal{C}^\infty$ en ses deux variables (voir [29], [16]). On peut en donner une représentation spectrale. Avec $\{e_j(\omega)\}_{j\ge1}$ désignant l'ensemble des valeurs propres (comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant) de $H_L(\omega,0)$ et avec $\{\phi_j\}_{j\ge1}$ l'ensemble des fonctions propres associées :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\overline{\Lambda_L}\times\overline{\Lambda_L},\quad G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0)=\sum_{j=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}\phi_j(\mathbf{x})\overline{\phi_j(\mathbf{y})}$$

Cette série est absolument convergente sur $\overline{\Lambda_L}\times\overline{\Lambda_L}$. Pour le voir, il suffit d'utiliser que $(H_L(\omega,0)+1)^{-1}$ est borné de $L^2(\Lambda_L)\to L^\infty(\Lambda_L)$. Ainsi les fonctions propres $\phi_j(\cdot)$, qui appartiennent à $\mathrm{Dom}(H_L(0,0))$, vérifient l'estimation uniforme en $\mathbf{x}\in\overline{\Lambda_L}$ et en $j\in\mathbb{N}^*$:

$$|\phi_j(\mathbf{x})|\le c(e_j(\omega)+1)$$

Il reste à utiliser (3.20) et le fait que $W_L(\beta,\omega,0)$ est un opérateur à trace pour conclure. Voici des estimations établies dans [29] sur les deux premières dérivées de $G_L(\cdot\,,\mathbf{y};\beta,0,0)$. Il existe une autre constante $c>0$ telle que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y},\beta)\in\Lambda_L\times\Lambda_L\times\mathbb{R}_+^*$ et uniformément en $L\geq 1$:

$$|\partial_{x_j}G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,0,0)|\leq c\frac{(1+\beta)^3}{\sqrt{\beta}}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};2\beta,0,0)\quad j\in\{1,2,3\}$$
$$|\partial_{x_j}\partial_{x_i}G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,0,0)|\leq c\frac{(1+\beta)^3}{\beta}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};2\beta,0,0)\quad i,j\in\{1,2,3\}$$

A partir de ces deux estimations et par l'intermédiaire de la régularisation par les phases magnétiques (une telle méthode sera utilisée dans le chapitre 4), il est établi dans [16] une estimation sur la première dérivée de $G_L(\cdot\,,\mathbf{y};\beta,\omega,0)$. Il existe une autre constante $c>0$ telle que $\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y},\beta,\omega)\in\Lambda_L\times\Lambda_L\times\mathbb{R}_+^*\times\mathbb{R}$ et uniformément en $L\geq 1$:

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0)|\leq c(1+|\omega|)^3\frac{(1+\beta)^5}{\sqrt{\beta}}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};8\beta,0,0)\tag{3.46}$$

où $\mathbf{n}$ est un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$. En l'absence du potentiel vecteur dans le membre de gauche de (3.46), on peut prouver par une méthode similaire à celle dans [16] l'estimation suivante (pour une autre constante $c>0$) :

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}})G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0)|\leq c(1+|\omega|)^3L\frac{(1+\beta)^5}{\sqrt{\beta}}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};4\beta,0,0)$$

où le facteur L provient de la majoration de $|\partial_{x_j}\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})|$, avec $\phi(\mathbf{x},\mathbf{y}):=\frac{\mathbf{e}_3}{2}\cdot(\mathbf{y}\wedge\mathbf{x})$. La présence du potentiel vecteur dans (3.46) permet ainsi de "réguler" la croissance en L.

Remarque 3.15. Puisque l'opérateur $H_L(\omega,V)$, $L\in[1,\infty)$, est défini avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$, alors :

$$G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,V)=0\quad\text{si }\mathbf{x}\in\partial\Lambda_L\text{ ou }\mathbf{y}\in\partial\Lambda_L\tag{3.47}$$

Remarque 3.16. Etant donné (3.45) et (3.46), on utilisera par la suite l'estimation commune suivante. Il existe une constante $c>0$ telle que $\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y},\beta,\omega)\in\Lambda_L\times\Lambda_L\times\mathbb{R}_+^*\times\mathbb{R}$:

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,0)|\leq c(1+|\omega|)^3\frac{(1+\beta)^5}{\sqrt{\beta}}G_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};8\beta,0,0)\tag{3.48}$$

avec $L\in[1,\infty]$ et $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$.

3.1 Preuve de la Proposition 3.3

On se place sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**) annoncées à la page 70. Voici la stratégie en trois étapes pour démontrer l'estimation (3.4) :

(1) On utilise la transformation de Laplace écrite au sens des noyaux (3.23) afin de "transporter" l'estimation (3.48) sur $|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\lambda)|$ dans le cas où $\lambda\in\rho(H_L(\omega,0))$ tel que $\lambda<0$ avec $|\lambda|$ suffisamment grand (cf. Lemme 3.17).

(2) On étend l'estimation obtenue en (1) au cas où V vérifie l'hypothèse (**H3'**) en utilisant la seconde équation résolvante (en fait son adjoint) au sens des noyaux (cf. Lemme 3.18) :

$$(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) = (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)+ \\ - \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,0,\lambda)V(\mathbf{z})R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

(3) On transfère l'estimation obtenue en (2) dans le cas où $\xi \in \rho(H_L(\omega,V))$ en utilisant la première équation résolvante au sens des noyaux :

$$(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) = (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)+ \\ + (\xi-\lambda)\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V,\lambda)R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\xi) \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

On énonce seulement les résultats intermédiaires nécessaires à la preuve de la Proposition 3.3 ; la preuve de ces résultats se situe dans l'annexe de cette section.

Lemme 3.17. *Soient $L \in [1,\infty]$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega,0))$ tel que $\Re\lambda < 0$. Soient $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$ et $j \in \{1,2,3\}$. Alors :*
(i). $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)$ est continue sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$.
(ii). Il existe une constante $c = c(\Re\lambda) > 0$ telle que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$:

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)| \leq c(1+|\omega|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}, \quad C_1 := \frac{\sqrt{-(\Re\lambda + C_0)}}{2} > 0 \tag{3.49}$$

Lemme 3.18. *Soient $L \in [1,\infty]$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Avec V satisfaisant l'hypothèse **(H3')**, soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\lambda < 0$ avec $|\lambda|$ suffisamment grand (i.e. $\lambda < -C_0$, voir (1.41)). Soient $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$ et $j \in \{1,2,3\}$. Alors :*
(i). $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)$ est continue sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$.
(ii). Il existe une constante $c = c(\lambda, \|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}}) > 0$ telle que $\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$:

$$|\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)| \leq c(1+|\omega|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{8}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}, \quad C_1 := \frac{\sqrt{-(\lambda + C_0)}}{2} > 0 \tag{3.50}$$

Preuve Proposition 3.3.
(*i*). Soit $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $\lambda \in \rho(H_L(\omega,V))$ tel que $\lambda < -C_0$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega,V))$ quelconque. A partir de la première équation résolvante au sens des noyaux, on a sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$:

$$(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) = (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)+ \\ + (\xi-\lambda)\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V,\lambda)R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\xi) \tag{3.51}$$

Le premier noyau du membre de droite est continu sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$ d'après le Lemme 3.18. Compte-tenu des estimations (3.50) et (3.3), le Lemme 3.20 assure que le second noyau du membre de droite de (3.51) est continu sur $(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$.

(ii). Soit $\eta > 0$. A partir de (3.51) et utilisant (ii) Proposition 3.1, il existe un réél δ_0 et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$:

$$\begin{aligned}\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad & |\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi)| \\ & \leq c(1+|\omega|)^3\Big(\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} + |\xi-\lambda|p(|\xi|)\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\Big)\end{aligned}$$

où on a utilisé l'estimation (3.50) et le fait que pour $\lambda < -C_0$ avec $|\lambda|$ suffisamment grand :

$$\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{8}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \leq \mathrm{e}^{-(\frac{C_1}{8}-\delta_0)|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \leq \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$$

Ensuite, le Lemme 3.25 (pour majorer l'intégrale par rapport à $\mathbf{z}$) fournit l'existence d'un autre polynôme $p(\cdot)$ tel que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}\big(\xi, \sigma(H_L(\omega, V))\big) \geq \eta$:

$$\begin{aligned}\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad & |\mathbf{n}\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi)| \\ & \leq p(|\xi|)(1+|\omega|)^3\Big(\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} + \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\Big)\end{aligned}$$

Pour conclure, il reste à utiliser (3.20) permettant d'obtenir :

$$\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = |\mathbf{x}-\mathbf{y}|\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{4(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{4(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \leq \Big(\frac{4(1+|\xi|)}{\delta_0 e}\Big)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{4(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}$$

■

3.2 Annexe

Preuve Lemme 3.17.
Soient $L \in [1,\infty]$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soit $\lambda \in \rho(H_L(\omega,0))$ tel que $\Re\lambda < 0 \leq \inf(\sigma(H_L(\omega,0)))$.
(i). A partir de l'estimation (3.48) et compte-tenu de (3.44), il existe une constante $c > 0$ telle que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y},t,\omega) \in \Lambda_L \times \Lambda_L \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}$ et pour tout $j \in \{1,2,3\}$:

$$|\mathrm{e}^{\lambda t}(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};t,\omega,0)| \leq \frac{c}{(16\pi)^{\frac{3}{2}}}(1+|\omega|)^3\mathrm{e}^{\Re\lambda t}t^{-2}(1+t)^5\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}} \tag{3.52}$$

Le majorant dans (3.52) est intégrable en $t \sim 0$ quand $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| > 0$ et en $t \sim +\infty$ quand $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \geq 0$. Ainsi il existe une autre constante $c > 0$ telle que $\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})$ avec $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \geq d > 0$:

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,|\mathrm{e}^{\lambda t}(i\partial_{x_j}+\omega a_j(\mathbf{x}))G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};t,\omega,0)| \leq c(1+|\omega|)^3\int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\Re\lambda t}t^{-2}(1+t)^5\mathrm{e}^{-\frac{d^2}{16t}} < +\infty \tag{3.53}$$

Utilisant la transformation de Laplace au sens des noyaux (3.23), il s'ensuit :

$$(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda) = \int_0^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\lambda t}(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))G_L(\mathbf{x},\mathbf{y};t,\omega,0) \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y} \tag{3.54}$$

et les estimations ci-dessus assurent que $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$ en vertu du théorème de continuité sous le signe intégrale.
(ii). Soit $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| > 0$. A partir de (3.54) puis en utilisant (3.52), il existe $c > 0$ telle que :

$$|(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)| \leq c(1+|\omega|)^3 \sum_{k=0}^{5} \frac{5!}{(5-k)!k!} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\Re\lambda t} t^k \frac{\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}}{t^2}$$

En remarquant que $16|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{-2}\frac{d}{dt}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}} = t^{-2}\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}$, par une intégration par parties :

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\Re\lambda t} t^k \frac{\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}}{t^2} = \frac{16}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \big[-\Re\lambda t - k\big] t^{k-1} \mathrm{e}^{\frac{\Re\lambda t}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\Re\lambda t}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}$$

Puisque $(0,+\infty) \ni t \mapsto \mathrm{e}^{\frac{\Re\lambda t}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}$ atteint son maximum en $t_0 := \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{-\Re\lambda}} > 0$:

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\Re\lambda t} t^k \frac{\mathrm{e}^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{16t}}}{t^2} \leq 16 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{-\Re\lambda}}{2\sqrt{2}}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, \big[-\Re\lambda t + k\big] t^{k-1} \mathrm{e}^{\frac{\Re\lambda t}{2}}$$

Il reste à utiliser que pour tout $k \in \mathbb{N}$, $\displaystyle\int_0^{+\infty} \mathrm{d}t\, t^k \mathrm{e}^{\frac{\Re\lambda t}{2}} \leq c(\Re\lambda, k) < +\infty$ et $\frac{C_1}{2} < \frac{\sqrt{-\Re\lambda}}{2\sqrt{2}}$.

■

La preuve du Lemme 3.18 nécessite le résultat technique suivant :

<u>Lemme</u> 3.19. *Soit $\gamma > 0$ un réél. Soit $V \in L^p_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $1 \leq p \leq \infty$. Alors :*
(i). Pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, $V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|} \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^p(\mathbb{R}^3)$.
De plus, il existe une constante $c(\gamma, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}}) > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$:

$$\max\big\{\|V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|}\|_1, \|V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|}\|_p\big\} \leq c(\gamma, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}}) \tag{3.55}$$

(ii). Soit $\alpha \in (0,3)$ un réél. Sous la condition que $p \geq 1$ vérifie $p > 3/(3-\alpha)$, pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, $V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|}|\mathbf{x}-\cdot|^{-\alpha} \in L^1(\mathbb{R}^3)$.
De plus, il existe une autre constante $c(\gamma, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}}) > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha} \leq c(\gamma, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}}) \tag{3.56}$$

Preuve Lemme 3.19.
(i). Soit $\gamma > 0$. On commence par décomposer l'intégrale :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} = \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} + \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}$$

Avec $q^{-1} := 1 - p^{-1}$, l'inégalité de Hölder donne pour la première intégrale :

$$\begin{aligned}\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} &\leq \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathrm{e}^{-q\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\right)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq \|V\|_{p,\mathrm{uloc}} \left(4\pi \int_0^1 \mathrm{d}r\, r^2\right)^{\frac{1}{q}} < +\infty\end{aligned}$$

où on a utilisé dans la dernière ligne les coordonnées sphériques usuelles.
D'autre part, en utilisant encore l'inégalité de Hölder (avec même q) :

$$\begin{aligned}\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} &\leq \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|^p \mathrm{e}^{-p\frac{\gamma}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\right)^{\frac{1}{p}} \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathrm{e}^{-q\frac{\gamma}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\right)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq \left(\sum_{k=1}^{\infty} \int_{k<|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<k+1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|^p \mathrm{e}^{-p\frac{\gamma}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\right)^{\frac{1}{p}} \left(4\pi \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r\, r^2 \mathrm{e}^{-q\frac{\gamma}{2}r}\right)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq c(\gamma)\, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}} \left(C \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \mathrm{e}^{-p\frac{\gamma}{2}k}\right)^{\frac{1}{p}} < +\infty\end{aligned}$$

où on a utilisé qu'il existe une constante $C > 0$ telle que, pour chaque k, "la coquille" $k < |\mathbf{z}| < k+1$ peut être recouverte par Ck^2 boules de rayon unité (voir par ex. [96], [97]).
Les deux estimations ci-dessus garantissent que $V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ et (3.55) est vérifiée.
Sans utiliser l'inégalité de Hölder, on montre que $V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|} \in L^p(\mathbb{R}^3)$ également.

(ii). Soient $\gamma > 0$ et $\alpha > 0$ des réels. Montrons que la condition $V \in L^{\frac{3}{3-\alpha}+\epsilon}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon > 0$ (aussi petit que l'on veut) est suffisante.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha} = \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha} + \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha}$$

Posons $\eta := \frac{\epsilon(3-\alpha)^2}{\alpha(1-\epsilon)+3\epsilon} > 0$. Par l'inégalité de Hölder avec $p = \frac{3-\eta}{(3-\alpha)-\eta}$ et $q = \frac{3-\eta}{\alpha}$:

$$\begin{aligned}\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha} &\leq \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(4\pi \int_0^1 \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-q\gamma r}}{r^{q\alpha-2}}\right)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq \|V\|_{\frac{3}{3-\alpha}+\epsilon,\mathrm{uloc}} \left(4\pi \int_0^1 \mathrm{d}r\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{3-\eta}{\alpha}\gamma r}}{r^{1-\eta}}\right)^{\frac{\alpha}{3-\eta}} < +\infty\end{aligned}$$

On voit que si $\epsilon = 0$, alors $\eta = 0$ et la dernière intégrale n'est plus convergente.
D'autre part, en utilisant encore l'inégalité de Hölder (avec mêmes p et q que ci-dessus) :

$$\begin{aligned}\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|>1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})| \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^\alpha} &\leq \left(\sum_{k=1}^{\infty} \int_{k<|\mathbf{x}-\mathbf{z}|<k+1} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |V(\mathbf{z})|^p \mathrm{e}^{-p\frac{\gamma}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\right)^{\frac{1}{p}} \left(4\pi \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r\, r^2 \mathrm{e}^{-q\frac{\gamma}{2}r}\right)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq c(\gamma)\, \|V\|_{\frac{3}{3-\alpha}+\epsilon,\mathrm{uloc}} \left(C \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \mathrm{e}^{-\frac{3-\eta}{(3-\alpha)-\eta}\frac{\gamma}{2}k}\right)^{\frac{(3-\alpha)-\eta}{3-\eta}} < +\infty\end{aligned}$$

Les deux estimations ci-dessus garantissent que $V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\cdot|}|\mathbf{x}-\cdot|^{-\alpha} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ avec (3.56).

■

Preuve Lemme 3.18.
Soient $L \in [1,\infty]$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soit $\lambda \in \rho\big(H_L(\omega,V)\big)$ tel que $\lambda < -C_0$ avec $|\lambda|$ assez grand.
La seconde équation résolvante permet d'écrire au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$:

$$R_L(\omega,V,\lambda) = R_L(\omega,0,\lambda) - R_L(\omega,V,\lambda)VR_L(\omega,0,\lambda)$$

Puisque chacun de ces opérateurs est auto-adjoint, en prenant l'adjoint correspondant de l'équation précédente, il vient au sens des noyaux sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$:

$$R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) = R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda) - \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,0,\lambda)V(\mathbf{z})R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)$$

La première chose à faire est de justifier l'existence de l'identité : $\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$,

$$\begin{aligned}(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) &= (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda) + \\ &- \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,0,\lambda)V(\mathbf{z})R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\lambda) \quad j \in \{1,2,3\}\end{aligned} \tag{3.57}$$

Il suffit pour cela de montrer que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$ et $j \in \{1,2,3\}$:

$$Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\cdot\,) := (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\cdot\,;\omega,0,\lambda)V(\cdot\,)R_L^{(1)}(\cdot\,,\mathbf{y};\omega,V,\lambda) \in L^1(\Lambda_L)$$

De par les estimations (3.49) et (3.9), il existe une constante $c = c(\lambda) > 0$ telle que :

$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{z})| \leq c(1+|\omega|)^3 \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}|V(\mathbf{z})|\frac{\mathrm{e}^{-C_1|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|} \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$$

qui devient en utilisant (3.73) :

$$\begin{aligned}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{z})| \leq c(1+|\omega|)^3 &\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\cdot \\ &\cdot\left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}|V(\mathbf{z})| + \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}|V(\mathbf{z})|\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right)\end{aligned}$$

Puis en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz dans la dernière intégrale entre parenthèses :

$$\begin{aligned}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{z})| \leq c(1+|\omega|)^3 &\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\Bigg\{\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}|V(\mathbf{z})| + \\ &+\left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}|V(\mathbf{z})|\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{2}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|^2}|V(\mathbf{z})|\right)^{\frac{1}{2}}\Bigg\}\end{aligned} \tag{3.58}$$

Puisque par hypothèse $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0 > 0$, on peut utiliser l'estimation (3.56) pour majorer uniformément en $\mathbf{x}$ chacune des intégrales entre accolades dans (3.58).
Par conséquent, il existe une constante $c = c(\lambda, \|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}}) > 0$ telle que :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{z})| \leq c(\lambda, \|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}})(1+|\omega_0|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{3.59}$$

Ainsi $Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\cdot\,) \in L^1(\Lambda_L)$ et (3.57) est justifiée. Prouvons (i) et (ii) à partir de (3.57).
(i). D'une part, d'après (i) Lemme 3.17, $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$. D'autre part avec les estimations (3.49) et (3.9) respectivement sur $|(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,0,\lambda)|$ et $|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)|$, le Lemme 3.22 assure que sous l'hypothèse (**H3'**), la fonction $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,Q_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{z})$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.

(ii). A partir de (3.57), en utilisant (3.49) et (3.59), il existe $c = c(\lambda, \|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}}) > 0$ telle que :

$$|(i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\lambda)| \leq c(1+|\omega|)^3\left(\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} + \frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\right) \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Pour achever la preuve, il reste à utiliser (3.20) pour le dernier terme :

$$\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = |\mathbf{x}-\mathbf{y}|\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \leq \left(\frac{8}{eC_1}\right)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{C_1}{8}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

■

4 Différence des noyaux des résolvantes

Ce paragraphe est consacré aux preuves des Propositions 3.4 et 3.5. On se place sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**) (cf. page 70) afin de pouvoir utiliser l'estimation (3.4).

Soient $\omega \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega,V)) \cap \rho(H_\infty(\omega,V))$, avec $L \in [1,\infty)$.
Les deux preuves reposent sur l'expression de la différence des noyaux des résolvantes basée sur la deuxième identité de Green (voir [74] et [92]) :

$$\begin{aligned} &R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) = \\ &\quad -\frac{1}{2}\int_{\partial\Lambda_L} \mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})\, R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V,\xi)\mathbf{n_z}\cdot\nabla_{\mathbf{z}}R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\xi) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda_L \end{aligned} \tag{3.60}$$

où $\mathbf{n_z}$ désigne la normale extérieure à $\partial\Lambda_L$ en $\mathbf{z}$ et $\mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})$ la mesure sur $\partial\Lambda_L$ définie par :

$$\forall\, \mathbf{z}\in\partial\Lambda_L, \quad \begin{cases} \mathrm{d}z_1\mathrm{d}z_2 & \text{si } \mathbf{z} = (z_1,z_2,\pm L/2) \\ \mathrm{d}z_2\mathrm{d}z_3 & \text{si } \mathbf{z} = (\pm L/2,z_2,z_3) \\ \mathrm{d}z_1\mathrm{d}z_3 & \text{si } \mathbf{z} = (z_1,\pm L/2,z_3) \end{cases}$$

On rappelle que pour tout réél $\kappa > 0$, l'ensemble Λ_κ est défini par :

$$\Lambda_\kappa := \{\mathbf{x}\in\Lambda_L \,:\, \mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L) \leq \kappa\} \quad L\in[1,\infty)$$

Preuve Proposition 3.4.
(i). Soient $\omega\in\mathbb{R}$, $\xi\in\rho(H_L(\omega,V))\cap\rho(H_\infty(\omega,V))$, $L\in[1,\infty)$. D'après la Remarque 3.15, pour tout $(\mathbf{z},\mathbf{y})\in\partial\Lambda_L\times\Lambda_L$, $\mathbf{n_z}\cdot(i\nabla_{\mathbf{z}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{z}))R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\xi) = \mathbf{n_z}\cdot i\nabla_{\mathbf{z}}R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,V,\xi)$.
D'une part, pour tout $\mathbf{z}\in\partial\Lambda_L$, $(\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa)\ni\mathbf{x}\mapsto R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V,\xi)\mathbf{n_z}\cdot\nabla_{\mathbf{z}}R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,V,\xi)$ est continue (comme produit de fonctions continues) d'après (i) Propositions 3.1 et 3.3.
D'autre part, via les estimations (3.2) et (3.4), il existe $c(|\xi|,\kappa)>0$ telle que :

$$\forall\, z\in\partial\Lambda_L,\ \forall\,\mathbf{x}\in\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa, \quad |R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V,\xi)\mathbf{n_z}\cdot\nabla_{\mathbf{z}}R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,V,\xi)| \leq c(|\xi|,\kappa)(1+|\omega|)^3$$

Par conséquent, $(\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa)\ni\mathbf{x}\mapsto\{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V,\xi)\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ est continue par application du théorème de continuité sous le signe intégrale dans (3.60).
(ii). Soit $\eta>0$. A partir de (3.60) et utilisant (ii) Propositions 3.1 et 3.3, il existe un réél

$\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))) \geq \eta$ et pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \times (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa)$,

$$\int_{\partial\Lambda_L} \mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})\, |R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi)\mathbf{n}_\mathbf{z} \cdot \nabla_\mathbf{z} R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)|$$
$$\leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \int_{\partial\Lambda_L} \mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}(|\mathbf{x}-\mathbf{z}|+|\mathbf{z}-\mathbf{y}|)}}{\kappa^3}$$
$$\leq p^{'}(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{4(1+|\xi|)}(\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)+\mathrm{dist}(\mathbf{y},\partial\Lambda_L))}$$

où on a utilisé dans la dernière inégalité (par passage en coordonnées polaires) :

$$\forall\, \gamma > 0, \quad \int_{\partial\Lambda_L} \mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})\, \mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} \leq 6 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r\, r \mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{1+|\xi|}r} \leq c(\gamma)(1 + |\xi|)^2 \quad c(\gamma) > 0$$

Il reste à utiliser qu'il existe un autre polynôme $p(\cdot)$ tel que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))) \geq \eta$:

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)|$$
$$\leq |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| + |R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)| \leq p(|\xi|) \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

ce qui couvre les cas :

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \times \Lambda_\kappa, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_\kappa \times (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa), \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_\kappa \times \Lambda_\kappa \quad (\mathbf{x} \neq \mathbf{y})$$

■

Preuve Proposition 3.5.
(i). Soient $\omega \in \mathbb{R}$, $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$, $L \in [1, \infty)$. D'une part pour tout $\mathbf{z} \in \partial\Lambda_L$, $(\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \ni \mathbf{x} \mapsto (i\partial_{x_j} + \omega a_j(\mathbf{x}))R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi)\mathbf{n}_\mathbf{z} \cdot \nabla_\mathbf{z} R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{x}; \omega, V, \xi)$ est continue. D'autre part, il existe une constante $c(|\xi|, \kappa) > 0$ telle que $\forall\, z \in \partial\Lambda_L$ et $\forall\, \mathbf{x} \in \Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa$,

$$|\mathbf{n} \cdot (i\nabla_\mathbf{x} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi)\mathbf{n}_\mathbf{z} \cdot \nabla_\mathbf{z} R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{x}; \omega, V, \xi)| \leq c(|\xi|, \kappa)(1 + |\omega|)^6$$

L'application du théorème de continuité sous l'intégrale dans (3.60) permet de conclure.
(ii). Soit $\eta > 0$. Par les mêmes arguments que ceux utilisés dans la preuve précédente, il existe un réél $\delta_0 > 0$ et un polynôme $p(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))) \geq \eta$ et pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \times (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa)$,

$$\int_{\partial\Lambda_L} \mathrm{d}\sigma(\mathbf{z})\, |\mathbf{n} \cdot (i\nabla_\mathbf{x} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, V, \xi)\mathbf{n}_\mathbf{z} \cdot \nabla_\mathbf{z} R_L^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi)|$$
$$\leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^6 \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{4(1+|\xi|)}(\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)+\mathrm{dist}(\mathbf{y},\partial\Lambda_L))}$$

Il reste à utiliser qu'il existe un autre polynôme $p(\cdot)$ tel que pour tout $\xi \in \rho(H_L(\omega, V)) \cap \rho(H_\infty(\omega, V))$ vérifiant $\mathrm{dist}(\xi, \sigma(H_\infty(\omega, V))) \geq \eta$ et pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$:

$$|\mathbf{n} \cdot (i\nabla_\mathbf{x} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V, \xi))| \leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_0}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2}$$

ce qui couvre les cas :

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \times \Lambda_\kappa, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_\kappa \times (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa), \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_\kappa \times \Lambda_\kappa \quad (\mathbf{x} \neq \mathbf{y})$$

■

5 Annexe

Les résultats établis dans les Lemmes 3.20 et 3.21 ci-dessous sont prouvés dans [23] et [24] avec des hypothèses plus générales.

Lemme 3.20. *Soient $L \in [1, \infty]$ et $l \in \{1, 2\}$.*
Soient $N_l(\cdot\,,\cdot\,) : (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L \to \mathbb{C}$ des noyaux intégraux vérifiant les hypothèses :
(i). $N_1(\cdot\,, \mathbf{z})$ et $N_2(\mathbf{z}, \cdot\,)$ sont continus sur $\Lambda_L \setminus \{\mathbf{z}\}$ pour presque tout $\mathbf{z} \in \Lambda_L$,
(ii). Il existe des réels $\gamma_l > 0$, $c_l > 0$ et $\alpha_l \in [0, 3)$ tels que :

$$\forall\,(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |N_l(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq c_l \frac{\mathrm{e}^{-\gamma_l |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\alpha_l}} \quad l \in \{1, 2\} \tag{3.61}$$

Alors $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \mathcal{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \displaystyle\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.

Preuve Lemme 3.20.
On commence par prouver le lemme dans le cas $1 \leq L < \infty$.
Soient $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0 \in \Lambda_L$ tels que $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{y}_0$. Soit ς un réél satisfaisant :

$$0 < \varsigma < \min\left\{\mathrm{dist}(\mathbf{x}_0, \partial\Lambda_L), \mathrm{dist}(\mathbf{y}_0, \partial\Lambda_L), \frac{1}{3}|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|\right\}$$

Soit $\varepsilon > 0$ fixé. Montrons que ς peut être choisi de telle manière que :

$$|\mathcal{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)| < \varepsilon \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \text{ et } \mathbf{y} \in \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$$

où $\mathcal{B}(\mathbf{x}, r)$ désigne la boule ouverte centrée en $\mathbf{x}$ et de rayon $r > 0$.
Pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$ et pour tout $\mathbf{y} \in \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$, on a :

$$\begin{aligned}
|\mathcal{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)| \leq & \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})| + \\
& + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})| + \\
& + \left| \int_{\Lambda_L \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma))} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \{N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y}) - N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})\} \right|
\end{aligned}$$

Etant donné l'hypothèse (ii) du lemme, il existe une constante $c > 0$ telle que pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$ et $\mathbf{z} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)$, $|N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c|\mathbf{x} - \mathbf{z}|^{-\alpha_1}$. Par passage en coordonnées sphériques, il existe $c^{'} > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$:

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c^{'} \varsigma^{3-\alpha_1} \tag{3.62}$$

Par les mêmes arguments, il existe une constante $c^{''} > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y}$:

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c^{''} \varsigma^{3-\alpha_2} \tag{3.63}$$

Les deux inégalités (3.62) et (3.63) sont encore valables pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$.
On choisit maintenant ς tel que $2c^{'}\varsigma^{3-\alpha_1} + 2c^{''}\varsigma^{3-\alpha_2} < \frac{\varepsilon}{2}$.
Il reste à montrer qu'avec un tel choix de ς la fonction ci-dessous est continue :

$$\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2) \ni (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \int_{\Lambda_L \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma))} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})$$

Remarquons que pour tout $\mathbf{z} \in \Lambda_L \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma))$, $|N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq cte$ uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y}$. Etan donné l'hypothèse (i), il reste à utiliser le théorème de continuité sous le signe intégrale pour conclure.

On prouve maintenant le lemme dans le cas $L = \infty$.
Soient $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^3$ tels que $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{y}_0$. Soit ς un réél satisfaisant $0 < \varsigma < \frac{1}{3}|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|$.
Soit $\varepsilon > 0$ fixé. Montrons que ς peut être choisi de telle manière que :

$$|\mathcal{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)| < \varepsilon \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \text{ et } \mathbf{y} \in \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$$

Soit $R > 0$ un réél satisfaisant $R > 2|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|$.
Pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$ et pour tout $\mathbf{y} \in \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$, on a :

$$\begin{aligned}
|\mathcal{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)| \leq & \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})| + \\
& + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})| + \\
& + \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| + \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})| + \\
& + \left| \int_{\left(\mathbb{R}^3 \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma))\right) \cap \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \{N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y}) - N_1(\mathbf{x_0}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y_0})\} \right|
\end{aligned}$$

D'une part, par les mêmes arguments que dans le cas $L < \infty$, il existe deux autres constantes $c' > 0$ et $c'' > 0$ toutes deux indépendantes de $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ telles que :

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c' \varsigma^{3-\alpha_1}, \quad \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c'' \varsigma^{3-\alpha_2}$$

et ces deux estimations sont encore valables pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$.
On choisit maintenant ς tel que $2c' \varsigma^{3-\alpha_1} + 2c'' \varsigma^{3-\alpha_2} < \frac{\varepsilon}{3}$.
D'autre part, en vertu de l'hypothèse (ii), il existe une autre constante $c > 0$ telle que pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2)$ et $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$, on ait :

$$|N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq c\, \mathrm{e}^{-\gamma_1 |\mathbf{x} - \mathbf{z}|} \mathrm{e}^{-\gamma_2 |\mathbf{z} - \mathbf{y}|}$$

Puis en utilisant que $\mathcal{B}(\mathbf{x}, R - d/3) \subset \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$ et $\mathcal{B}(\mathbf{y}, R - 4d/3) \subset \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$ avec $d := |\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|$; par l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq \\
& c \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \|\chi_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}, R - d/3)} \mathrm{e}^{-\gamma_1 |\mathbf{x} - \cdot|}\|_2 \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3} \|\chi_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{y}, R - 4d/3)} \mathrm{e}^{-\gamma_2 |\cdot - \mathbf{y}|}\|_2 < +\infty \qquad (3.64)
\end{aligned}$$

Quitte à choisir R suffisamment grand, le membre de droite de (3.64) est strictement plus petit que $\frac{\varepsilon}{6}$. L'inégalité (3.64) est encore valable pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$.
Il reste à montrer qu'avec un tel choix de ς et R la fonction ci-dessous est continue :

$$\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma/2) \ni (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \int_{\left(\mathbb{R}^3 \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma))\right) \cap \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})$$

Notons que pour $\mathbf{z} \in \left(\mathbb{R}^3 \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0, \varsigma))\right) \cap \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$, $|N_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) N_2(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \leq cte$ uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y}$. On conclut par le théorème de continuité sous le signe intégrale.

■

Lemme 3.21. *Soient $L \in [1,\infty]$ et $l \in \{1,2\}$. Soient $N_l(\cdot\,,\cdot\,) : (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L \to \mathbb{C}$ des noyaux intégraux vérifiant (i) et (ii) du Lemme 3.20. Alors sous l'hypothèse supplémentaire $\alpha_1 + \alpha_2 \in [0,3)$, $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \displaystyle\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$.*

Preuve Lemme 3.21.
Il suffit seulement de prouver la continuité de $\mathcal{R}(\cdot\,,\cdot\,)$ sur la diagonale D_L puisque d'après le Lemme 3.20, $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.

On commence par prouver le lemme dans le cas $1 \leq L < \infty$.
Soient $\mathbf{x}_0 \in \Lambda_L$ et ς un réél satisfaisant $0 < \varsigma < \mathrm{dist}(\mathbf{x}_0, \partial\Lambda_L)$.
Soit $\varepsilon > 0$ fixé. Montrons que ς peut être choisi de telle manière que :

$$|\mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{x}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_0)| < \varepsilon \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$$

Pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$, on a :

$$\begin{aligned}|\mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{x}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_0)| \leq \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x_0})| + \\ + \left| \int_{\Lambda_L \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \{N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x}) - N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x_0})\} \right|\end{aligned}$$

Par l'hypothèse (ii) et la condition $\alpha_1 + \alpha_2 \in [0,3)$, il existe une constante $c > 0$ telle que $\forall\, \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$ et $\forall\, \mathbf{z} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)$, $|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq c|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^{-(\alpha_1+\alpha_2)}$. Il s'ensuit alors :

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq c^{'} \varsigma^{3-(\alpha_1+\alpha_2)} \tag{3.65}$$

avec $c^{'} > 0$ une autre constante indépendante de $\mathbf{x}$. (3.65) est encore valable pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$.
On choisit maintenant ς tel que $2c^{'}\varsigma^{3-(\alpha_1+\alpha_2)} < \frac{\varepsilon}{2}$.
Il reste à montrer qu'avec un tel choix de ς la fonction suivante est continue :

$$\mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2) \ni \mathbf{x} \mapsto \int_{\Lambda_L \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})$$

Il suffit d'appliquer le théorème de continuité sous le signe intégrale vu l'hypothèse (i).

On prouve maintenant le lemme dans le cas $L = \infty$.
Soient $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3$ et ς un réél satisfaisant $0 < \varsigma < r_0$.
Soit $\varepsilon > 0$ fixé. Montrons que ς peut être choisi de telle manière que :

$$|\mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{x}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_0)| < \varepsilon \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$$

Soit $R > 0$ un réél satisfaisant $R > 2r_0$. Pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma/2)$, on a :

$$\begin{aligned}|\mathcal{R}(\mathbf{x},\mathbf{x}) - \mathcal{R}(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_0)| \leq \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x_0})| + \\ + \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| + \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x_0})| + \\ + \left| \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R) \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \{N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x}) - N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x_0})\} \right|\end{aligned}$$

Par l'hypothèse (ii) du lemme et la condition $\alpha_1+\alpha_2 \in [0,3)$, il existe une autre constante $c^{'} > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x}$:

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq c^{'}\varsigma^{3-(\alpha_1+\alpha_2)} \tag{3.66}$$

Notons que (3.66) est encore valable pour $\mathbf{x}=\mathbf{x}_0$. On choisit ς tel que $2c^{'}\varsigma^{3-(\alpha_1+\alpha_2)} < \frac{\varepsilon}{3}$. D'autre part, par l'hypothèse (ii) du lemme, il existe une autre constante $c>0$ telle que pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2)$ et $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)$, on ait $|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq c\,\mathrm{e}^{-(\gamma_1+\gamma_2)|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}$. Puis en utilisant que $\mathcal{B}(\mathbf{x},R-r_0) \subset \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)$:

$$\int_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq c \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \|\chi_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x},R-r_0)}\mathrm{e}^{-(\gamma_1+\gamma_2)|\mathbf{x}-\cdot|}\|_1 < +\infty \tag{3.67}$$

Quitte à choisir R suffisamment grand, le membre de droite de (3.67) est strictement plus petit que $\frac{\varepsilon}{6}$. L'inégalité (3.67) est encore valable pour $\mathbf{x}=\mathbf{x}_0$.
Il reste à montrer qu'avec un tel choix de ς et R la fonction suivante est continue :

$$\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2) \ni \mathbf{x} \mapsto \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})$$

Notons que pour tout $\mathbf{z} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)$, $|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{x})| \leq cte$ uniformément en $\mathbf{x}$. On conclut par le théorème de continuité sous le signe intégrale sachant l'hypothèse (i).

■

<u>Lemme</u> 3.22. *Soient $L \in [1,\infty]$ et $l \in \{1,2\}$.*
Soient $N_l(\cdot\,,\cdot) : (\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L \to \mathbb{C}$ des noyaux intégraux vérifiant (i) et (ii) Lemme 3.20.
Soit $V \in L^p_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $p \geq 1$ vérifiant $p > 3/(3-\max\{\alpha_1,\alpha_2\})$ si $\alpha_1+\alpha_2 \neq 0$.
Alors $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \displaystyle\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$.

Preuve Lemme 3.22.
On démontre seulement le cas $L=\infty$.
Soient $\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^3$ tels que $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{y}_0$. Soit ς un réél satisfaisant $0<\varsigma<\frac{1}{3}|\mathbf{x}_0-\mathbf{y}_0|$.
Soit $\varepsilon>0$ fixé. Montrons que ς peut être choisi de telle manière que :

$$|\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x},\mathbf{y}) - \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0)| < \varepsilon \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2) \text{ et } \mathbf{y} \in \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma/2)$$

Soit $R>0$ un réél satisfaisant $R > 2|\mathbf{x}_0-\mathbf{y}_0|$. Pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2)\times\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma/2)$,

$$\begin{aligned}
&|\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x},\mathbf{y}) - \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0)| \leq \\
&\quad \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y_0})| + \\
&\quad + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| + \int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y_0})| + \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| + \int_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y_0})| + \\
&\quad + \left| \int_{\left(\mathbb{R}^3\setminus(\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)\cup\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma))\right)\cap\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \{N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y}) - N_1(\mathbf{x_0},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y_0})\} \right|
\end{aligned}$$

D'une part, il existe une constante $c > 0$ telle que $\forall\, z \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, \varsigma)$ et uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y}$, on ait $|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq c|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^{-\alpha_1}|V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma_1|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}$. Par l'inégalité de Hölder avec $p^{-1}+q^{-1}=1$ et $q < 3\alpha_1^{-1}$, il existe une constante $c^{'} > 0$ indépendante de $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ telle que :

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq c\, \mathrm{ess}\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \|V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma_1|\cdot-\mathbf{x}|}\|_p \left(\int_{\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^{q\alpha_1}}\right)^{\frac{1}{q}} \leq c^{'}\varsigma^{3q^{-1}-\alpha_1} \tag{3.68}$$

où on a utilisé que $\|V(\cdot)\mathrm{e}^{-\gamma_1|\cdot-\mathbf{x}|}\|_p \leq c(\gamma_1, \|V\|_{p,\mathrm{uloc}})$ uniformément en $\mathbf{x}$, cf. Lemme 3.19. Par les mêmes arguments (l'inégalité de Hölder doit être appliquée avec $q < 3\alpha_2^{-1}$), il existe une constante $c^{''} > 0$ indépendante de $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ telle que :

$$\int_{\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq c^{''}\varsigma^{3q^{-1}-\alpha_2} \tag{3.69}$$

Les deux inégalités (3.68) et (3.69) sont encore valables pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$.
On choisit maintenant ς tel que $2c^{'}\varsigma^{3q^{-1}-\alpha_1} + 2c^{''}\varsigma^{3q^{-1}-\alpha_2} < \frac{\varepsilon}{3}$.
D'autre part, en vertu de l'hypothèse (ii), il existe une autre constante $c > 0$ telle que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma/2)$ et $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$, on ait :

$$|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq c\,\mathrm{e}^{-\gamma_1|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}|V(\mathbf{z})|\mathrm{e}^{-\gamma_2|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}$$

Soient $q_1, q_2 \geq 1$ tels que $q_1^{-1} + q_2^{-1} = p^{-1}$. En utilisant que $\mathcal{B}(\mathbf{x}, R-d/3) \subset \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$ et $\mathcal{B}(\mathbf{y}, R-4d/3) \subset \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$ avec $d := |\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0|$; par l'inégalité de Hölder généralisée :

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| &\leq c\, \mathrm{ess}\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \|V(\cdot)\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\cdot|}\|_p \cdot \\ \cdot\ \mathrm{ess}\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \|\chi_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{x},R-d/3)}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\cdot|}\|_{q_1}\ \mathrm{ess}\sup_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3} \|\chi_{\mathbb{R}^3\setminus\mathcal{B}(\mathbf{y},R-4d/3)}\mathrm{e}^{-\gamma_2|\cdot-\mathbf{y}|}\|_{q_2} &< +\infty\end{aligned} \tag{3.70}$$

Quitte à choisir R suffisamment grand, le membre de droite de (3.70) est strictement plus petit que $\frac{\varepsilon}{6}$. L'inégalité (3.70) est encore valable pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$.
Il reste à montrer qu'avec un tel choix de ς et R la fonction suivante est continue :

$$\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma/2) \times \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma/2) \ni (\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \int_{\left(\mathbb{R}^3\setminus(\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma)\cup\mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma))\right)\cap\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,R)} \mathrm{d}\mathbf{z}\, N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})$$

On a pour $\mathbf{z} \in \left(\mathbb{R}^3 \setminus (\mathcal{B}(\mathbf{x}_0,\varsigma) \cup \mathcal{B}(\mathbf{y}_0,\varsigma))\right) \cap \mathcal{B}(\mathbf{x}_0, R)$, $|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})V(\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq cte|V(\mathbf{z})|$ uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y}$. Puisque $L^p_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^p_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3) \subset L^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3)$, on peut conclure par le théorème de continuité sous le signe intégrale.

■

Remarque 3.23. Sous les hypothèses supplémentaires $\alpha_1 + \alpha_2 \in [0,3)$ et $V \in L^p_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $p \geq 1$ satisfaisant $p > 3/(3-\alpha_1-\alpha_2)$, $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$.

Remarque 3.24. La décroissance exponentielle exigée pour chacun des noyaux $N_l(\cdot\,,\cdot\,)$ est cruciale pour qu'on puisse considérer des potentiels du type $V \in L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ (avec une certaine condition sur p). Pour illustrer ceci, considérons le cas où $N_1(\cdot\,,\cdot\,)$ vérifie (i) et (ii) du Lemme 3.20 et où $N_2(\cdot\,,\cdot\,) = cste$. Alors on ne peut espérer mieux que $V \in L^p(\mathbb{R}^3)$ avec $p > 3/(3-\alpha_1)$ si $\alpha_1 \neq 0$ pour que le résultat du Lemme 3.22 reste valable.

Lemme 3.25. *Soient $L \in [1,\infty]$ et $l \in \{1,2\}$. Soient $N_l(\cdot\,,\cdot\,) : (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L \to \mathbb{C}$ des noyaux intégraux. Supposons qu'il existe $\gamma_l > 0$, $c_l > 0$ et $\alpha_l \in \{0,1,2\}$ tels que :*

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |N_l(\mathbf{x},\mathbf{y})| \leq c_l \frac{\mathrm{e}^{-\gamma_l|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\alpha_l}} \quad l \in \{1,2\}$$

Alors il existe une constante $c = c(\gamma_1,\gamma_2) > 0$ indépendante du domaine Λ_L telle que :

$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq \begin{cases} c\dfrac{\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\min(\alpha_1,\alpha_2)}} & \alpha_1,\alpha_2 \neq 1 \\ c\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} & \alpha_1 = 1 = \alpha_2 \end{cases} \tag{3.71}$$

Preuve Lemme 3.25.
L'ingrédient principal est l'estimation suivante : pour tout réél $\gamma > 0$ et $\alpha \in [0,3)$:

$$\sup_{\mathbf{x}\in\Lambda_L} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\,\frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\alpha}} \leq \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\,\frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\alpha}} = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r\, r^{2-\alpha}\mathrm{e}^{-\gamma r} = \frac{\tilde{\Gamma}(3-\alpha)}{\gamma^{3-\alpha}} \tag{3.72}$$

uniformément en $\mathbf{x} \in \Lambda_L$ et $\tilde{\Gamma}(\cdot\,)$ désignant la fonction gamma d'Euler (voir par ex. [1]).
Soient $\alpha_1 \in [0,3)$ et $\alpha_2 = 0$. Pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$:

$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \leq c_1c_2\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \sup_{\mathbf{x}\in\Lambda_L} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^{\alpha_1}}$$

Soit $\alpha_1 = 1 = \alpha_2$. En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\begin{aligned} \forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad & \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \\ & \leq c_1c_2\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{2}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|} \\ & \leq c_1c_2\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \sup_{\mathbf{x}\in\Lambda_L} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\gamma_1|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}\right)^{\frac{1}{2}} \sup_{\mathbf{y}\in\Lambda_L} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\gamma_2|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|^2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Soient $\alpha_1 = 2$ et $\alpha_2 = 1$. Remarquons que pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{z} \neq \mathbf{y}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2|\mathbf{z}-\mathbf{y}|} &= \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\left(\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} + \frac{1}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right)\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|+|\mathbf{z}-\mathbf{y}|} \\ &\leq \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\left(\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} + \frac{1}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right) \end{aligned} \tag{3.73}$$

Ainsi par l'intermédiaire de (3.73) :

$$\begin{aligned} \forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad & \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\,|N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \\ & \leq c_1c_2\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2} + \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{2}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right) \end{aligned}$$

En vertu de (3.72), la première intégrale se majore uniformément en $\mathbf{x}$. Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz suivie de (3.72), la seconde intégrale se majore uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$. Enfin soient $\alpha_1 = 2$ et $\alpha_2 = 2$. Remarquons que pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{z} \neq \mathbf{y}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2|\mathbf{z}-\mathbf{y}|^2} &= \left(\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} + \frac{1}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right)^2 \frac{1}{(|\mathbf{x}-\mathbf{z}| + |\mathbf{z}-\mathbf{y}|)^2} \\ &\leq \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}\left(\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} + \frac{1}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right)^2 \end{aligned} \tag{3.74}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} &\forall\, (\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |N_1(\mathbf{x},\mathbf{z})N_2(\mathbf{z},\mathbf{y})| \\ &\leq c_1 c_2 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\min(\gamma_1,\gamma_2)}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2} + \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{2}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|^2} + 2\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_1}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma_2}{2}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\right) \end{aligned}$$

Il suffit d'utiliser l'estimation (3.72) pour les deux premières intégrales entre parenthèses ; pour la dernière, on utilise encore l'inégalité de Cauchy-Schwarz suivi de (3.72).

■

Chapitre 4

Théories des perturbations magnétiques à volume fini

L'objectif principal de ce chapitre est d'exprimer les grandeurs grand-canonique, caractéristiques de la réponse (dia)magnétique du gaz quantique quasi-parfait confiné, en termes du noyau intégral de la résolvante à volume fini (pour la pression et la densité) et de ses dérivées partielles par rapport à l'intensité du champ magnétique pour les susceptibilités généralisées (voir expressions (2.10)). Pour cela, on met en œuvre une théorie des perturbations magnétiques sur le noyau intégral de la résolvante à volume fini, adaptée aux besoins du chapitre 5. Comme les ingrédients principaux sont les estimations de la Proposition 3.1 et de la Proposition 3.3, on utilisera désormais les hypothèses (**H1'**) et (**H3'**) (voir page 70) à la place des hypothèses (**H1**) et (**H3**) du paragraphe 3.1 chapitre 1.

Dans un premier temps, on utilise la théorie des perturbations magnétiques usuelle (méthode de la section 3 du chapitre 2 adaptée pour les noyaux) sur le noyau intégral de la résolvante à volume fini pour prouver son analycité par rapport à ω. Cela nous permet d'identifier ses dérivées n-ièmes et par suite de donner une expression des traces définissant les susceptibilités généralisées en termes de ces noyaux. Cependant avec cette méthode, on verra que les estimations obtenues sur les traces croîssent polynômialement en L.

Dans une deuxième partie, on utilise une autre théorie des perturbations magnétiques dite "régularisée" sur le noyau intégral de la résolvante à volume fini. L'idée est d'isoler la singularité de la perturbation magnétique au travers d'un facteur de phase (magnétique). Une "factorisation" appropriée de cette phase rend cette théorie des perturbation plus "régulière". On obtient ainsi une nouvelle expression des traces définissant les susceptibilités généralisées dont les estimations croîssent au plus comme L^3. De telles estimations sont appropriées pour mettre en œuvre la stratégie qui sera utilisée dans le chapitre 5.

On supprime comme dans le chapitre 2 la dépendance explicite en "V" dans les notations. On introduit systématiquement le paramètre $\epsilon = \pm 1$ dans les notations ; on rappelle que $\epsilon = -1$ fait référence au gaz de bosons et $\epsilon = +1$ au gaz de fermions.

1 Résultats principaux

Avant d'énoncer les principaux résultats, rappelons la définition de quelques opérateurs introduits dans la section 3, chapitre 2 ; et introduisons de nouvelles notations.

Sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**) (voir énoncés à la page 70) , soit $H_L(\omega_0)$, avec $\omega_0 \in \mathbb{R}$, l'Hamiltonien à une particule avec conditions de bord de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$. Soit $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\operatorname{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$, $e_1(\omega_0) := \inf \sigma(H_L(\omega_0))$.
Par la suite, $D_L := \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L \,:\, \mathbf{x} = \mathbf{y}\}$ désignera la diagonale dans $\Lambda_L \times \Lambda_L$.
Soit $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0, \xi) : (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L \to \mathbb{C}$ le noyau intégral de $(H_L(\omega_0) - \xi)^{-1} := R_L(\omega_0, \xi)$.
Soient $S_{1,L}(\omega_0, \xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L(\omega_0, \xi)$ et $S_{2,L}(\omega_0, \xi) := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})R_L(\omega_0, \xi)$ les opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$ (voir estimation (4.27)) générés par leur noyau intégral continu sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$ défini respectivement par :

$$S_{1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.1}$$

$$S_{2,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.2}$$

Pour $k \in \mathbb{N}^*$ et $(i_1, \ldots, i_k) \in \{1, 2\}^k$, soit l'opérateur de Hilbert-Schmidt (cf. section 3, chapitre 2) $J_{k,L}(i_1, \ldots, i_k)(\omega_0, \xi) := R_L(\omega_0, \xi) \prod_{m=1}^k S_{i_m,L}(\omega_0, \xi)$ de noyau intégral :

$$J_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{k-1} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_k \, R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega_0, \xi) S_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega_0, \xi) \cdots$$
$$\cdots S_{i_{k-1},L}(\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_k; \omega_0, \xi) S_{i_k,L}(\mathbf{z}_k, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$, excepté sur la diagonale D_L lorsque $i_1 = 1$ pour $k = 1$ et lorsque $i_1 + \ldots + i_k = k$ avec $k \geq 2$ (voir Remarque 4.10).
Pour $n \in \mathbb{N}^*$, $n \geq k \geq 1$, soit $\chi_k^n(i_1, \ldots, i_k)$ la fonction caractéristique définie par :

$$\chi_k^n(i_1, \ldots, i_k) = \begin{cases} 1 & \text{si } i_1 + \cdots + i_k = n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.3}$$

Soit $\mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0)$ un voisinage complexe de ω_0 sur lequel la fonction à valeurs opérateurs $\omega \mapsto R_L(\omega, \xi)$ est $\mathfrak{B}$-analytique, voir Proposition 2.10. En vertu de la Proposition 2.21 :

$$\forall\, \omega \in \mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0), \quad R_L(\omega, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega - \omega_0)^n}{n!} \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\omega_0, \xi), \quad \text{avec :} \tag{4.4}$$

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\omega_0, \xi) := n! \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1, \ldots, i_k) J_{k,L}(i_1, \ldots, i_k)(\omega_0, \xi) \tag{4.5}$$

et par convention $(\partial_\omega^0 R_L)(\omega_0, \xi) := R_L(\omega_0, \xi)$.

Le premier résultat de ce chapitre établit que pour ω suffisamment proche de ω_0, l'opérateur $R_L(\omega, \xi)$ défini en (4.4) possède un noyau intégral analytique en ω :

Théorème 4.1. *Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\operatorname{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$. Alors :*
(i). Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $(\partial_\omega^n R_L)(\omega_0, \xi)$ est un opérateur intégral.
Son noyau intégral noté $(\partial_\omega^n R_L)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0, \xi)$, continu sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$, est défini par :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := n! \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1, \ldots, i_k) J_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.6}$$

avec la convention $(\partial_\omega^0 R_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ *pour* $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$. *De plus il existe des constantes* $c(|\xi|) > 0$, *et* $\delta_\xi > 0$ *suffisamment petit, telles que :*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}, \quad \frac{1}{n!}\left|\frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right| \leq c^{n+1}(|\xi|)(1+|\omega_0|)^{3n} L^n \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2^n}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{4.7}$$

(ii). Il existe un voisinage complexe $\nu_{\xi,L}(\omega_0)$ *de* ω_0 *tel que pour tout* $\omega \in \nu_{\xi,L}(\omega_0)$, *l'opérateur* $R_L(\omega,\xi)$ *possède un noyau intégral* $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ *donné par :*

$$R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega-\omega_0)^n}{n!} \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) \tag{4.8}$$

De plus $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ *est continu sur* $(\Lambda \times \Lambda_L) \setminus D_L$.

La croissance polynomiale en L dans l'estimation (4.7) rend compte de la singularité de la perturbation magnétique. L'utilisation de la théorie des perturbations magnétiques "régularisée" (voir par ex. [30], [29], [78],...) permet d'obtenir une autre expression des dérivées partielles $(\partial_\omega^n R_L)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi) = (\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ ayant la particularité que la singularité de la perturbation se retrouve isolée au travers d'un facteur de phase magnétique.

Soient $\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z} \in \Lambda_L$. Introduisons la phase magnétique ϕ et le flux magnétique fl comme :

$$\phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \frac{1}{2}\mathbf{e}_3 \cdot (\mathbf{y} \wedge \mathbf{x}) = -\phi(\mathbf{y},\mathbf{x}) \ \text{ (propriété d'antisymétrie)} \tag{4.9}$$

$$\mathrm{fl}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) := \phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) + \phi(\mathbf{y},\mathbf{z}) + \phi(\mathbf{z},\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{e}_3 \cdot \big\{(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{z}-\mathbf{y})\big\} \tag{4.10}$$

La quantité fl représente le flux magnétique à travers le triangle défini par les trois vecteurs. Pour tout entier $n \geq 1$ et $\mathbf{x} = \mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$ des vecteurs arbitraires dans Λ_L, on définit :

$$\begin{aligned} &\mathrm{Fl}_n(\mathbf{x},\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_n) := \phi(\mathbf{y}_n,\mathbf{x}) + \sum_{k=0}^{n-1} \phi(\mathbf{y}_k,\mathbf{y}_{k+1}), \\ &\text{avec} \quad \mathrm{Fl}_1(\mathbf{x},\mathbf{z}_1) = 0 \ \text{ et } \ \mathrm{Fl}_n(\mathbf{x},\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_n) = \sum_{k=1}^{n-1} \mathrm{fl}(\mathbf{x},\mathbf{y}_k,\mathbf{y}_{k+1}) \quad n \geq 2 \end{aligned} \tag{4.11}$$

La quantité Fl_n représente le flux magnétique à travers le contour polygonal $\mathbf{y}_n \cdots \mathbf{y}_0 \mathbf{y}_n$. Introduisons les opérateurs dans la classe de Hilbert-Schmidt $T_{i,L}(\omega_0,\xi)$ avec $i \in \{1,2\}$, générés par leur noyau intégral continu sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$ respectivement défini par :

$$T_{1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x})) R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) \tag{4.12}$$

$$T_{2,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x}-\mathbf{y}) R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) \tag{4.13}$$

Soit $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$. Pour $k \in \mathbb{N}^*$, $m \in \mathbb{N}$, soit la fonction continue (cf. paragraphe 3.2) :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := &\sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j) \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \cdot \\ &\cdot \frac{\big(i(\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j) - \phi(\mathbf{z}_j,\mathbf{x}) + \phi(\mathbf{z}_j,\mathbf{y}))\big)^m}{m!} R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega_0,\xi) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega_0,\xi) \\ &\cdots T_{i_{j-1},L}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega_0,\xi) T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j,\mathbf{y};\omega_0,\xi) \end{aligned} \tag{4.14}$$

où dans le cas $m = 0$ on adopte la convention $0^0 = 1$.

Basé sur la théorie des perturbations magnétiques "régularisée", le deuxième résultat de ce chapitre fournit une nouvelle expression de la n-ième dérivée partielle (par rapport à l'intensité du champ magnétique) du noyau intégral de la résolvante à volume fini :

Théorème 4.2. *Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\operatorname{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$. Alors pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$, on a :*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \frac{1}{n!}\frac{\partial^n R_L^{(1)}}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \frac{\big(i\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})\big)^n}{n!} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) + \sum_{k=1}^{n} \mathcal{T}_{k,L}^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.15}$$

De plus, on a l'estimation uniforme en $L \geq 1$:

$$|\mathcal{T}_{k,L}^{m}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega_0, \xi)| \leq c_{m,k}(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^{3k} \tag{4.16}$$

où $c_{m,k}(|\xi|) := c^{m+k}(|\xi|)\frac{m^{2m}}{m!}\sum_{j=1}^{k} j^{2m}$ et $c(|\xi|) > 0$ est une autre constante.

Le troisième résultat important de ce chapitre utilise l'expression des dérivées partielles du noyau intégral de la résolvante du Théorème 4.2 pour réécrire les grandeurs caractéristiques (plus précisément leur prolongement analytique au domaine $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$) de la réponse (dia)magnétique du gaz quantique quasi-parfait :

Corollaire 4.3. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, avec $\epsilon = \pm 1$, les domaines définis en (2.1). Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K le contour orienté positivement du type (2.14) inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir (2.13).*
Alors la pression grand-canonique à volume fini s'écrit encore comme :

$$P_L(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{4.17}$$

Et la densité grand-canonique à volume fini s'écrit encore comme :

$$\rho_L(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \beta z \frac{\partial P_L}{\partial z}(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{1}{L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{4.18}$$

où $\xi \mapsto (\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon)^{-1}$ est la distribution de Bose-Einstein ($\epsilon = -1$), Fermi-Dirac ($\epsilon = +1$). Quant aux susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini, elles s'écrivent aussi :

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega_0, z, \epsilon) &= \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \frac{\partial^n R_L^{(1)}}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\ &= n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \sum_{k=1}^{n} \mathcal{T}_{k,L}^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega_0, \xi) \end{aligned} \tag{4.19}$$

avec $\mathcal{T}_{k,L}^{n-k}(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$ la fonction continue définie en (4.14).

En particulier, pour l'aimantation et la susceptibilité[1] *grand-canonique à volume fini :*

$$\mathcal{X}_L^1(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = \\ -\left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega_0,\xi) \quad (4.20)$$

$$\mathcal{X}_L^2(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = 2\left(\frac{q}{c}\right)^2\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot \\ \cdot\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\cdot\left\{\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_2\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega_0,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega_0,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z}_2,\mathbf{x};\omega_0,\xi)+\right. \\ \left.-\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)T_{2,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega_0,\xi)\right\} \quad (4.21)$$

Corollaire 4.4. *Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$. Alors pour $\omega \in \mathbb{R}$ assez proche de 0 :*

$$P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = P_L(\beta,0,z,\epsilon) + \frac{\omega^2}{2}\left(\frac{c}{q}\right)^2\mathcal{X}_L^2(\beta,0,z,\epsilon) + \mathcal{O}(\omega^4)$$

En particulier, l'aimantation en champ magnétique nul est identiquement nulle :

$$\mathcal{X}_L^1(\beta,\omega=0,z,\epsilon) = 0 \quad (4.22)$$

Remarque 4.5. Les résultats du Théorème 4.1 peuvent être étendus sur $\overline{\Lambda_L}$ car $H_L(\omega)$ est essentiellement auto-adjoint sur $\{\varphi : \varphi \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Lambda_L}),\ \varphi \restriction \partial\Lambda_L = 0\}$, voir chapitre 3.

Remarque 4.6. La théorie des perturbations magnétiques "régularisée" joue un rôle essentiel. En effet l'expression des dérivées partielles du noyau intégral de la résolvante fournie par cette théorie permet de mettre en évidence que les traces définissant la pression et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini croissent au plus comme L^3.

Remarque 4.7. Dans (4.7) et (4.16) les constantes $c(|\xi|)$ peuvent être remplacées par des polynômes en $|\xi|$. Quant à δ_ξ dans (4.7), $\delta_\xi = \delta/(1+|\xi|)$ avec $\delta > 0$ suffisamment petit.

Remarque 4.8. Les résultats du Corollaire 4.3 restent encore valables lorsque les domaines $\overline{\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))}$ sont étendus à $\mathcal{D}_\epsilon(e_1(\omega_0))$ (dépendants de L).

Remarque 4.9. Par l'intermédiaire des opérateurs $T_{1,L}(\omega_0,\xi)$ et $T_{2,L}(\omega_0,\xi)$ générés par les noyaux intégraux (4.12) et (4.13), l'aimantation et la susceptibilité grand-canonique à volume fini peuvent également s'écrire (de manière plus concise) :

$$\mathcal{X}_L^1(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = -\left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda_L)}\left\{\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)R_L(\omega_0,\xi)T_{1,L}(\omega_0,\xi)\right\}$$

$$\mathcal{X}_L^2(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = 2\left(\frac{q}{c}\right)^2\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda_L)}\left\{\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)R_L(\omega_0,\xi)\cdot\right. \\ \left.\cdot\left\{T_{1,L}(\omega_0,\xi)T_{1,L}(\omega_0,\xi) - T_{2,L}(\omega_0,\xi)\right\}\right\}$$

[1] Comme indiqué dans la chapitre 2, il s'agit ici seulement de la contribution liée aux moments magnétiques orbitaux des particules du gaz quantique confiné.

2 Analycité du noyau intégral de la résolvante à volume fini

L'objectif de cette section est de réécrire *au sens des noyaux* le développement en série de la résolvante à volume fini (2.30) (voir Proposition 2.21) afin de déduire l'analycité locale de son noyau intégral. En particulier, on prouve le Théorème 4.1.
Sa preuve repose non seulement sur l'utilisation des estimations (3.2) et (3.4), voir Proposition 3.1 et Proposition 3.3 respectivement, mais également sur le Lemme 3.20.

Preuve de (i) **Théorème 4.1**.

Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\mathrm{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$. On commence par montrer que $(\partial_\omega^n R_L)(\omega_0, \xi)$ défini en (4.5) est un opérateur intégral pour tout $n \in \mathbb{N}$. Il suffit pour cela d'utiliser que $R_L(\omega_0, \xi)$ est borné de $L^2(\Lambda_L) \to L^\infty(\Lambda_L)$ (voir paragraphe 2.1, chapitre 3) et que les opérateurs $S_{i,L}(\omega_0, \xi)$, avec $i \in \{1, 2\}$, sont bornés sur $L^2(\Lambda_L)$. Pour estimer les normes opérateurs de $S_{i,L}(\omega_0, \xi)$, on utilise les estimations sur leur noyau intégral à partir des Propositions 3.1 et 3.3. Ainsi il existe une constante $c(|\xi|) > 0$ uniforme en $L \geq 1$ telle que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |S_{1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|) L (1 + |\omega_0|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \tag{4.23}$$

$$|S_{2,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|) L^2 \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \tag{4.24}$$

avec $\delta_\xi > 0$ suffisamment petit. Le facteur L provient de l'estimation $|\mathbf{a}(\mathbf{x})| \leq |\mathbf{x}|$.
En utilisant que :

$$\forall\, a, b > 0,\ \forall\, t > 0, \quad t^a \mathrm{e}^{-bt} \leq \left(\frac{2a}{b\mathrm{e}}\right)^a \mathrm{e}^{-\frac{b}{2}t} \tag{4.25}$$

il existe une autre constante $c(|\xi|) > 0$ et un autre réél $\delta_\xi > 0$ assez petit tels que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |S_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|) L^i (1 + |\omega_0|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \quad i \in \{1, 2\} \tag{4.26}$$

D'une part, par le critère de Shur-Holmgren (voir par ex. [109]) :

$$\begin{aligned} \|S_{i,L}(\omega_0, \xi)\| &\leq \max\left\{ \sup_{\mathbf{x} \in \Lambda_L} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |S_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)|, \sup_{\mathbf{y} \in \Lambda_L} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |S_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \right\} \\ &\leq c^{'}(|\xi|) L^i (1 + |\omega_0|)^3 \end{aligned} \tag{4.27}$$

et d'autre part :

$$\|R_L(\omega_0, \xi)\|_{2,\infty} = \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x} \in \Lambda_L} \left(\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq c^{''}(|\xi|) \tag{4.28}$$

où on a utilisé pour ces deux estimations les arguments de la preuve du Lemme 3.25 ; on déduit, à partir de l'expression (4.5), l'existence d'une autre constante $c(|\xi|) > 0$ uniforme en $L \geq 1$ telle que :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}, \quad \frac{1}{n!} \left\| \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\omega_0, \xi) \right\|_{2,\infty} \leq c^n(|\xi|) L^n (1 + |\omega_0|)^{3n} \|R_L(\omega_0, \xi)\|_{2,\infty} < +\infty$$

En vertu du théorème de Dunford-Pettis (voir par ex. [101]), $(\partial_\omega^n R_L)(\omega_0,\xi)$ est un opérateur intégral dans le sens :

$$\forall\, \phi \in L^2(\Lambda_L), \quad \big((\partial_\omega^n R_L)(\omega_0,\xi)\phi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, (\partial_\omega^n R_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\phi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\Lambda_L$$

Par identification, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, son noyau intégral est défini sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$ par :

$$\frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := n!\sum_{k=1}^{n}(-1)^k \sum_{i_j\in\{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1,\dots,i_k) J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) \quad (4.29)$$

avec $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ défini d'abord en dehors de la diagonale D_L par :

$$J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) := \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_k\, R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega_0,\xi) S_{i_1,L}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega_0,\xi)\cdots S_{i_k,L}(\mathbf{z}_k,\mathbf{y};\omega_0,\xi) \quad (4.30)$$

On s'intéresse maintenant à la régularité de $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$.
La continuité sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$ de $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est une conséquence du Lemme 3.20. En effet, pour $k=1$, à partir des estimations (4.26) et (3.2), le Lemme 3.20 assure que $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \big(R_L(\omega_0,\xi)S_{i_1,L}(\omega_0,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\, R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)S_{i_1,L}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$. Et d'après (3.71), il existe une constante $c(|\xi|)>0$ telle que :

$$\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)S_{i_1,L}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)| \le c^2(|\xi|)L^{i_1}(1+|\omega_0|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$$

pour $\delta_\xi>0$ suffisamment petit. Pour $k=2$, étant donné l'estimation ci-dessus, le Lemme 3.20 assure que $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\big(R_L(\omega_0,\xi)S_{i_1,L}(\omega_0,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{z})S_{i_2,L}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$. Et d'après (3.71), il existe une autre constante $c(|\xi|)>0$ telle que :

$$\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|(R_L(\omega_0,\xi)S_{i_1,L}(\omega_0,\xi))(\mathbf{x},\mathbf{z})S_{i_2,L}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)| \le c^3(|\xi|)L^{i_1+i_2}(1+|\omega_0|)^6\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{4}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$$

Ainsi en appliquant k-fois le Lemme 3.20, on déduit que $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L)\setminus D_L$. Et il existe une autre constante $c(|\xi|)>0$ telle que :

$$|J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)| \le c^{k+1}(|\xi|)L^{i_1+\cdots+i_k}(1+|\omega_0|)^{3k}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2^k}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad (4.31)$$

Etant donné l'expression (4.29) du noyau, on déduit (4.7) à partir de l'estimation (4.31).

■

Remarque 4.10. L'utilisation de l'estimation commune (4.26) est le facteur limitant dans la preuve de la régularité de $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$.
En effet lorsque $k=1$, si l'indice $i_1=2$ alors en vertu de l'estimation (4.24), le Lemme 3.21 assure que $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\, R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)S_{2,L}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$.
Ainsi, si parmi les noyaux $S_{i_j,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ $(1\le j\le k)$ intervenant dans l'expression de $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$, il y a au moins un noyau $S_{2,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$, les arguments utilisés ci-dessus assurent que $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$.

Remarque 4.11. Pour x réél, soit $\lceil x \rceil$ désignant la partie entière par excès de x, i.e. le plus petit entier supérieur ou égal à x. Pour tout entier $n \geq 1$, (4.29) peut encore s'écrire :

$$\frac{1}{n!}\frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) = (-1)^n \sum_{i_j\in\{1,2\}^n} \chi_n^n(i_1,\dots,i_n) J_{n,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) + \\ + \Big(\sum_{1\leq k<\lceil \frac{n}{2}\rceil} + \sum_{\lceil \frac{n}{2}\rceil \leq k<n} \Big)(-1)^k \sum_{i_j\in\{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1,\dots,i_k) J_{k,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$$

Vu la définition (4.3) de la fonction caractéristique $\chi_k^n(i_1,\dots,i_k)$, la somme sur $1 \leq k < \lceil \frac{n}{2}\rceil$ ne comporte que des termes identiquement nuls. Quant à la seconde somme sur $\lceil \frac{n}{2}\rceil \leq k < n$, elle ne comporte que des termes continus sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ d'après la Remarque 4.10. La singularité sur D_L de $(\partial_\omega^n R_L)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ ne provient donc que du premier terme.

Preuve de (ii) **Théorème 4.1**.

Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\mathrm{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0),+\infty)\big) \geq \eta > 0$.
Soit $\mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0)$ un voisinage complexe de ω_0 sur lequel $\omega \mapsto R_L(\omega,\xi)$ est $\mathfrak{B}$-analytique.
Soit $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$. En utilisant que chaque $(\partial_\omega^n R_L)(\omega_0,\xi)$ est un opérateur intégral, on a :

$$(R_L(\omega,\xi)\varphi)(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega-\omega_0)^n}{n!} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, (\partial_\omega^n R_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\Lambda_L \tag{4.32}$$

En utilisant l'estimation (4.7), il existe une constante $c(|\xi|) > 0$ et un réél $\delta_\xi > 0$ suffisamment petit tels que pour presque tout $\mathbf{x} \in \Lambda_L$:

$$\sum_{n\geq 0} |\omega-\omega_0|^n \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y} \left| \frac{1}{n!}\frac{\partial^n R_L}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \right| \\ \leq c(|\xi|)\|\varphi\|_\infty \sum_{n\geq 0} \big(c(|\xi|)|\omega-\omega_0| L(1+|\omega_0|)^3\big)^n \mathrm{ess}\sup_{\mathbf{x}\in\Lambda_L} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2^n}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \\ \leq c^{'}(|\xi|)\|\varphi\|_\infty \sum_{n\geq 0} \big(4c(|\xi|)|\omega-\omega_0| L(1+|\omega_0|)^3\big)^n$$

où on a utilisé que pour tout $\alpha > 0$, $\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2^n}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = \big(\frac{2^n}{\alpha}\big)^2$ (voir par ex. [1]).
La série dans le membre de droite ci-dessus étant convergente pour ω assez proche de ω_0, le théorème de Tonelli assure alors l'intervertion de l'intégrale avec la somme dans (4.32) :

$$\big(R_L(\omega,\xi)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega-\omega_0)^n}{n!} (\partial_\omega^n R_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\Lambda_L$$

et ce résultat peut être étendu par continuité pour tout $\varphi \in L^2(\Lambda_L)$, d'où (4.8). Finalement, puisque la série ci-dessus est uniformément convergente en $\mathbf{x},\mathbf{y} \in \Lambda_L$ dès que $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \geq d > 0$, on conclut que l'application $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)$ est continue sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$.

■

3 Développement régularisé à volume fini

L'estimation (4.7), sur la n-ième dérivée partielle (par rapport à l'intensité du champ magnétique) du noyau intégral de la résolvante à volume fini, rend compte de la singularité de la perturbation (l'estimation croît polynomialement en L). Dans cette section, on établit une nouvelle expression de la n-ième dérivée partielle du noyau de la résolvante en utilisant la théorie des perturbations magnétiques régularisée (voir par ex. [29], [30], [17]) consistant à factoriser la singularité de la perturbation au travers d'un facteur de phase.

3.1 Préliminaires

Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\mathrm{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$.
Soient $T_{i,L}(\omega_0, \xi)$, $i \in \{1, 2\}$, les opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$ de noyau intégral respectif :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad T_{1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x})) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$
$$T_{2,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

En vertu des Propositions 3.1 et 3.3, les noyaux $T_{i,L}(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$ sont continus sur $(\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$. De plus, il existe une constante $c(|\xi|) > 0$ telle que uniformément en $L \geq 1$:

$$|T_{1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \tag{4.33}$$
$$|T_{2,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|)\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{4.34}$$

avec $\delta_\xi > 0$ suffisamment petit. On a utilisé l'estimation évidente $|\mathbf{a}(\mathbf{x} - \mathbf{y})| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$; puis dans (4.34) on a utilisé (4.25). On déduit l'estimation commune uniforme en $L \geq 1$:

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad |T_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq c(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad i \in \{1, 2\} \tag{4.35}$$

pour une autre constante $c(|\xi|) > 0$ et un autre réél $\delta_\xi > 0$ suffisamment petit.
Par le critère de Shur-Holmgren, on déduit les estimations sur les normes opérateurs :

$$\|T_{i,L}(\omega_0, \xi)\| \leq c(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^3 \quad i \in \{1, 2\}$$

pour une autre constante $c(|\xi|) > 0$ uniforme en $L \geq 1$.

Soit $\omega \in \mathbb{R}$ et posons $\delta\omega := \omega - \omega_0$. Soient $\tilde{T}_{i,L}(\omega, \omega_0, \xi)$ avec $i \in \{1, 2\}$ et $\tilde{R}_L(\omega, \omega_0, \xi)$ les opérateurs "régularisés" sur $L^2(\Lambda_L)$ définis par leur noyau intégral respectif :

$$\tilde{T}_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := \mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})} T_{i,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \quad i \in \{1, 2\} \tag{4.36}$$
$$\tilde{R}_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := \mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

A l'exception du facteur de phase $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{e}_3 \cdot (\mathbf{y} \wedge \mathbf{x})$, le noyau intégral de $\tilde{R}_L(\omega, \omega_0, \xi)$ (respectivement de $\tilde{T}_{i,L}(\omega, \omega_0, \xi)$) est le même que celui de $R_L(\omega_0, \xi)$ (resp. de $T_{i,L}(\omega_0, \xi)$). Utilisant à nouveau le critère de Shur-Holmgren, $\tilde{R}_L(\omega, \omega_0, \xi)$ et $\tilde{T}_{i,L}(\omega, \omega_0, \xi)$ sont des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$, i.e. il existe une autre constante $c(|\xi|) > 0$ telle que :

$$\max\big\{\|\tilde{R}_L(\omega, \omega_0, \xi)\|, \|R_L(\omega_0, \xi)\|\big\} \leq c(|\xi|),$$
$$\max\big\{\|\tilde{T}_{i,L}(\omega, \omega_0, \xi)\|, \|T_{i,L}(\omega_0, \xi)\|\big\} \leq c(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^3 \tag{4.37}$$

De plus ils appartiennent tout deux à la classe des opérateurs de Hilbert-Schmidt :

$$\|\tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} = \sqrt{\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y} |R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)|^2} = \|R_L(\omega_0,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c(|\xi|)|\Lambda_L|^{\frac{1}{2}}$$

$$\|\tilde{T}_{i,L}(\omega,\omega_0,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} = \|T_{i,L}(\omega_0,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c(|\xi|)(1+|\omega_0|)^3|\Lambda_L|^{\frac{1}{2}} \quad i \in \{1,2\}$$

pour une autre constante $c(|\xi|) > 0$.
Soient $j \geq 1$ un entier et $(i_1,\ldots,i_j) \in \{1,2\}^j$. Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, introduisons les familles d'opérateurs de Hilbert-Schmidt sur $L^2(\Lambda_L)$ définies par :

$$\tilde{J}_{j,L}(i_1,\ldots,i_j)(\omega,\omega_0,\xi) := \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\tilde{T}_{i_1,L}(\omega,\omega_0,\xi)\ldots\tilde{T}_{i_{j-1},L}(\omega,\omega_0,\xi)\tilde{T}_{i_j,L}(\omega,\omega_0,\xi) \tag{4.38}$$

et pour tout entier $k \geq j \geq 1$,

$$\tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\omega,\omega_0,\xi) := \sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j)\tilde{J}_{j,L}(i_1,\ldots,i_j)(\omega,\omega_0,\xi) \tag{4.39}$$

Pour $\omega \in \mathbb{R}$ tel que $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$, le résultat suivant fournit un développement de la résolvante $R_L(\omega,\xi)$ faisant intervenir les opérateurs régularisés définis ci-dessus.

Proposition 4.12. *Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$. Soit $\omega \in \mathbb{R}$ tel que $\xi \in \rho(H_L(\omega))$ aussi. Posons $\delta\omega = \omega - \omega_0$. Alors en tant qu'opérateurs de Hilbert-Schmidt, on a l'identité :*

$$R_L(\omega,\xi) = \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi) + \sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\omega,\omega_0,\xi) + \tilde{\mathcal{T}}_{n+1,L}(\omega,\omega_0,\xi) \tag{4.40}$$

avec :

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathcal{T}}_{n+1,L}(\omega,\omega_0,\xi) := \\
&\quad (\delta\omega)^{n+1}\Bigg\{\sum_{k=0}^{n-1}(\delta\omega)^k\sum_{j=1}^{n}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^{k+n+1}(i_1,\ldots,i_j)\tilde{J}_{j,L}(i_1,\ldots,i_j)(\omega,\omega_0,\xi)+ \\
&+(-1)^{n+1}\sum_{k=0}^{n+1}(\delta\omega)^k\sum_{i_l\in\{1,2\}^{n+1}}\chi_{n+1}^{k+n+1}(i_1,\ldots,i_{n+1})R_L(\omega,\xi)\prod_{m=1}^{n+1}\tilde{T}_{i_m,L}(\omega,\omega_0,\xi)\Bigg\}
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Preuve Proposition 4.12.
Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$. Soit $\omega \in \mathbb{R}$ tel que $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ également.
Au sens des opérateurs de Hilbert-Schmidt sur $L^2(\Lambda_L)$, on prouve d'abord l'identité :

$$R_L(\omega,\xi) = \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi) - R_L(\omega,\xi)\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi) \tag{4.42}$$

avec $\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)$ l'opérateur borné sur $L^2(\Lambda_L)$ défini par :

$$\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi) := \delta\omega\tilde{T}_{1,L}(\omega,\omega_0,\xi) + (\delta\omega)^2\tilde{T}_{2,L}(\omega,\omega_0,\xi) \tag{4.43}$$

où $\tilde{T}_{i,L}(\omega,\omega_0,\xi)$, avec $i \in \{1,2\}$, sont les opérateurs générés par les noyaux (4.36).
Remarquons d'abord que $\mathbf{a}(\cdot)$ étant la "jauge symétrique", pour chaque $\mathbf{y} \in \Lambda_L$ fixé, on a

l'identité valable sur $\mathrm{Dom}(H_L(\omega)) = \mathrm{Dom}(H_L(0)) := \{\varphi \,:\, \varphi \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Lambda_L}),\, \varphi \restriction \partial\Lambda_L = 0\}$ (le domaine sur lequel $H_L(\omega)$ est essentiellement auto-adjoint) :

$$(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))\mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})} = \mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}) - \delta\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y})) \tag{4.44}$$

En utilisant d'une part (4.44) suivi par des intégrations par parties, et d'autre part que le noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est solution de l'équation au sens des distributions :

$$(H_L(\omega_0) - \xi)R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})$$

on obtient une identité d'abord valable pour $\varphi \in \mathrm{Dom}(H_L(\omega))$, et $\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$:

$$\langle (H_L(\omega) - \overline{\xi})\varphi, \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle = \langle\varphi,\psi\rangle + \langle\varphi,\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle \tag{4.45}$$

Puisque l'opérateur $\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)$ est borné sur $L^2(\Lambda_L)$, l'application :

$$\mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L) \ni \psi \mapsto \langle (H_L(\omega) - \overline{\xi})\varphi, \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle$$

peut être étendue en une fonctionnelle linéaire et bornée sur $L^2(\Lambda_L)$. Comme $H_L(\omega)$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathrm{Dom}(H_L(\omega))$, l'application $\varphi \mapsto \langle (H_L(\omega)-\overline{\xi})\varphi, \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle$, avec $\psi \in L^2(\Lambda_L)$, peut être étendue sur $D(H_L(\omega))$ (le domaine d'auto-adjontion).
Par conséquent $\forall\,\psi \in L^2(\Lambda_L)$, $\tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi \in D(H_L(\omega))$, d'où :

$$\langle\varphi,(H_L(\omega)-\xi)\tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle = \langle\varphi,\psi\rangle + \langle\varphi,\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)\psi\rangle$$

puis par un argument de densité :

$$(H_L(\omega)-\xi)\tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi) = \mathbb{1} + \tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)$$

ce qui achève la preuve de (4.42).
Maintenant en itérant n-fois (4.42), il vient au sens des opérateurs de Hilbert-Schmidt :

$$R_L(\omega,\xi) = \tilde{R}_L(\omega,\omega_0,\xi)\Big[\mathbb{1} + \sum_{k=1}^{n}(-1)^k\big(\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)\big)^k\Big] + (-1)^{n+1}R_L(\omega,\xi)\big(\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)\big)^{n+1}$$

En reprenant les arguments utilisés dans la preuve de la Proposition 2.21, on a :

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{n}(-1)^k\big(\delta\omega\tilde{T}_{1,L}(\omega,\omega_0,\xi) + (\delta\omega)^2\tilde{T}_{2,L}(\omega,\omega_0,\xi)\big)^k = \\
&\qquad\sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\prod_{m=1}^{j}\tilde{T}_{i_m,L}(\omega,\omega_0,\xi) + \\
&\qquad\qquad+\sum_{k=n+1}^{2n}(\delta\omega)^k\sum_{j=1}^{n}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\prod_{m=1}^{j}\tilde{T}_{i_m,L}(\omega,\omega_0,\xi)
\end{aligned}$$

et l'identité suivante :

$$\begin{aligned}
&(-1)^{n+1}R_L(\omega,\xi)\big(\tilde{T}_L(\omega,\omega_0,\xi)\big)^{n+1} = \\
&\qquad(-1)^{n+1}\sum_{k=n+1}^{2n+2}(\delta\omega)^k\sum_{i_l\in\{1,2\}^{n+1}}\chi_{n+1}^k(i_1,\dots,i_{n+1})R_L(\omega,\xi)\prod_{m=1}^{n+1}\tilde{T}_{i_m,L}(\omega,\omega_0,\xi)
\end{aligned}$$

■

Remarque 4.13. Le développement (au sens des opérateurs) de la résolvante (4.40) en puissance de $\delta\omega$ n'est pas complet puisqu'il comporte encore des opérateurs régularisés (dépendant encore de ω). Il est donc nécessaire de poursuivre ce développement au sens des noyaux pour faire "sortir" tous les $\delta\omega$. Ceci est l'objet du prochain paragraphe.

3.2 Preuve du Théorème 4.2

Soient $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \rho(H_L(\omega_0))$ tel que $\mathrm{dist}\big(\xi, [e_1(\omega_0), +\infty)\big) \geq \eta > 0$.
Soit $\mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0)$ un voisinage complexe de ω_0 tel que pour tout $\omega \in \mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0)$, $\xi \in \rho(H_L(\omega))$ (c'est toujours possible car $H_L(\omega)$ est un opérateur m-sectoriel, voir Lemme 1.23) et tel que pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L$, $\mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0) \ni \omega \mapsto R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi)$ soit analytique. En réécrivant le développement (4.40) en termes des noyaux intégraux correspondants, on obtient pour tout $\omega \in \mathcal{V}_{\xi,L}(\omega_0) \cap \mathbb{R}$ (sur cet intervalle $R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \cdot\,, \xi)$ est analytique réélle) :

$$\begin{aligned}\forall\,(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L, \quad R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi) = \mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) + \\ + \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) + \tilde{\mathcal{T}}_{1,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) + \tilde{\mathcal{T}}_{2,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) \quad (4.46)\end{aligned}$$

avec pour tout entier $k \geq 1$ et pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}} \chi_j^k(i_1, \ldots, i_j) \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \cdot \\ \cdot\, \mathrm{e}^{i\delta\omega(\phi(\mathbf{x},\mathbf{z}_1)+\phi(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2)+\cdots+\phi(\mathbf{z}_j,\mathbf{y}))} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega_0, \xi) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega_0, \xi) \cdots \\ \cdots T_{i_{j-1},L}(\mathbf{z}_{j-1}, \mathbf{z}_j; \omega_0, \xi) T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \quad (4.47)\end{aligned}$$

ainsi que pour tout entier $n \geq 1$ et pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{T}}_{1,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := (\delta\omega)^{n+1} \sum_{k=0}^{n-1} (\delta\omega)^k \sum_{j=1}^{n} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^{k+n+1}(i_1, \ldots, i_j) \cdot \\ \cdot \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \tilde{R}_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega, \omega_0, \xi) \tilde{T}_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega, \omega_0, \xi) \cdots \tilde{T}_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{T}}_{2,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := (-1)^{n+1} (\delta\omega)^{n+1} \sum_{k=0}^{n+1} (\delta\omega)^k \sum_{i_l \in \{1,2\}^{n+1}} \chi_{n+1}^{k+n+1}(i_1, \ldots, i_{n+1}) \cdot \\ \cdot \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{n+1}\, R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega, \xi) \tilde{T}_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega, \omega_0, \xi) \ldots \tilde{T}_{i_{n+1},L}(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi)\end{aligned}$$

Remarquons que le noyau $\tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \omega_0, \xi)$ défini en (4.47) est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$. Pour le voir, il suffit d'appliquer j-fois le Lemme 3.21 étant donné (3.2) et l'estimation commune (4.35) (une méthode similaire a déjà été utilisée dans la preuve de (i) Théorème 4.1 page

105). De plus, puisque l'exponentielle peut être majorer par 1, on déduit l'existence d'une constante $c(|\xi|) > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$ et $L \geq 1$:

$$|\tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi)| \leq c^{k+1}(|\xi|)(1 + |\omega_0|)^{3k} \tag{4.48}$$

Notons qu'on dispose également des mêmes propriétés de continuité pour les noyaux $\tilde{\mathcal{T}}_{1,n+1,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega, \omega_0, \xi)$ et $\tilde{\mathcal{T}}_{2,n+1,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega, \omega_0, \xi)$.

Développons maintenant l'exponentielle, en facteur du noyau $R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0, \xi)$ dans (4.46), en série entière. Pour tout $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$, on a :

$$\mathrm{e}^{i\delta\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{k=0}^{n} (\delta\omega)^k \frac{\big(i\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})\big)^k}{k!} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) + \mathcal{T}_{3,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) \tag{4.49}$$

avec :

$$\mathcal{T}_{3,n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) := \sum_{k=n+1}^{\infty} (\delta\omega)^k \frac{\big(i\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})\big)^k}{k!} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

Développons également l'exponentielle en série entière à l'intérieur de (4.47). En utilisant pour $n \in \mathbb{N}^*$ la quantité $\mathrm{Fl}_n(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_n) := \phi(\mathbf{z}_n, \mathbf{x}) + \sum_{k=0}^{n-1} \phi(\mathbf{z}_k, \mathbf{z}_{k+1})$, $\mathbf{z}_0 := \mathbf{x}$, on a :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad \tilde{\mathcal{T}}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \omega_0, \xi) = \sum_{m=0}^{\infty} (\delta\omega)^m \mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.50}$$

avec (en utilisant la convention $0^0 = 1$) :

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1, \ldots, i_j) \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \cdot \\ \cdot \frac{\big(i(\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j) - \phi(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) + \phi(\mathbf{z}_j, \mathbf{y}))\big)^m}{m!} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega_0, \xi) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega_0, \xi) \cdots \\ \cdots T_{i_{j-1},L}(\mathbf{z}_{j-1}, \mathbf{z}_j; \omega_0, \xi) T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)\end{aligned} \tag{4.51}$$

où on a utilisé le théorème de Fubini pour intervertir la somme avec les intégrales compte-tenu du fait que l'estimation $|\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v})| \leq \sqrt{3}L^2$ entraîne que :

$$\big|i(\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j) - \phi(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) + \phi(\mathbf{z}_j, \mathbf{y}))\big| \leq 2(j+1)L^2$$

Notons également que la fonction $\mathcal{T}_{k,L}^m(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0, \xi)$ est continue sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$. En effet, à partir de la définition de Fl_j comme somme de phases, il suffit d'utiliser la formule du multinôme pour répartir chacune des phases (avec une certaine puissance) sous les intégrales. Il reste ensuite à appliquer j-fois le Lemme 3.21 pour chaque terme de la somme.

On a besoin pour continuer du lemme suivant :

Lemme 4.14. *Pour tout* $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$*, on a l'identité :*

$$\sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=1}^{k} \mathcal{T}_{m,L}^{k-m}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

Par l'intermédiaire du Lemme 4.14, on obtient :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\Lambda_L\times\Lambda_L,\quad \sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\sum_{m=0}^{\infty}(\delta\omega)^m\mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)=$$
$$\sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\sum_{m=1}^{k}\mathcal{T}_{m,L}^{k-m}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)+\mathcal{T}_{4,n+1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\omega_0,\xi)\quad(4.52)$$

avec :

$$\mathcal{T}_{4,n+1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\omega_0,\xi):=\sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\sum_{m=n-k+1}^{\infty}(\delta\omega)^m\mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$$

Au final à partir de (4.46), en réunissant (4.49) et (4.50) sachant (4.52), on a :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L,\quad R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)=$$
$$R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)+\sum_{k=1}^{n}(\delta\omega)^k\left\{\frac{\big(i\phi(\mathbf{x},\mathbf{y})\big)^k}{k!}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)+\sum_{m=1}^{k}\mathcal{T}_{m,L}^{k-m}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right\}+$$
$$+\sum_{l=1}^{2}\tilde{\mathcal{T}}_{l,n+1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\omega_0,\xi)+\mathcal{T}_{3,n+1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\omega_0,\xi)+\mathcal{T}_{4,n+1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\omega_0,\xi)\quad(4.53)$$

Par construction, les quatres termes dans la dernière ligne de (4.53) ont chacun leur n premières dérivées partielles (par rapport à ω) évaluées en ω_0 égales à 0. On peut alors identifier la n-ième dérivée partielle évaluées en ω_0 de la partie hors diagonale du noyau de la résolvante comme le coefficient multipliant la puissance n-ième de $\delta\omega$, d'où (4.15).

Reste à prouver (4.16). Soient $\mathbf{x}\in\Lambda_L$, $m\geq 1$ et $k\geq 1$ des entiers. A partir de (4.51), en utilisant les estimations (3.2) et (4.35), il existe une constante $c(|\xi|)>0$ telle que :

$$|\mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega_0,\xi)|\leq\sum_{j=1}^{k}\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)c^j(|\xi|)(1+|\omega_0|)^{3j}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_2\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\cdot$$
$$\cdot\,\frac{|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)|^m}{m!}\cdot\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$

pour $\delta_\xi>0$ suffisamment petit. Etant donné (4.11) sachant (4.10), on a l'estimation :

$$|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)|\leq\sum_{l=1}^{j-1}\sum_{l'=1}^{l}|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}||\mathbf{z}_l-\mathbf{z}_{l+1}|,\quad\mathbf{z}_0:=\mathbf{x}$$

D'où :

$$|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)|^m\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$
$$\leq\left(\sum_{l=1}^{j-1}\sum_{l'=1}^{l}|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}||\mathbf{z}_l-\mathbf{z}_{l+1}|\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\frac{1}{m}}}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|^{\frac{1}{m}}}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|^{\frac{1}{m}}}\right)^m\quad(4.54)$$

Pour $1 \leq l \leq j-1$, $1 \leq l^{'} \leq l$ et $\mathbf{z}_0 := \mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j \in \Lambda_L^{j+1}$, il existe $c^{'}(|\xi|) > 0$ telle que :

$$|\mathbf{z}_{l'-1} - \mathbf{z}_{l'}||\mathbf{z}_l - \mathbf{z}_{l+1}| \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\frac{1}{m}}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|^{\frac{1}{m}}} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{m}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|^{\frac{1}{m}}}$$
$$\leq c^{'}(|\xi|) m^2 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2m}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\frac{1}{m}}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2m}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|^{\frac{1}{m}}} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2m}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|^{\frac{1}{m}}} \quad (4.55)$$

où on a utilisé (4.25). Puis en insérant (4.55) dans (4.54) :

$$|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j)|^m \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\delta_\xi|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$
$$\leq (c^{'}(|\xi|))^m \left(\sum_{l=1}^{j-1} l m^2 \right)^m \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$
$$\leq (c^{'}(|\xi|))^m \left(j^2 m^2\right)^m \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$

Par le Lemme 3.25, il existe une constante $c^{''}(|\xi|) > 0$ telle que :

$$\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_2 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta_\xi}{2}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|} \leq c^{''}(|\xi|)$$

Au final, il existe une autre constante $c(|\xi|) > 0$ (uniforme en $L \geq 1$) telle que :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \Lambda_L, \quad |\mathcal{T}_{k,L}^m(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega_0, \xi)| \leq c^{m+k}(|\xi|) \left(\frac{m^{2m}}{m!} \sum_{j=1}^{k} j^{2m} \right) (1 + |\omega_0|)^{3k}$$

■

4 Application aux grandeurs grand-canonique à volume fini

L'objectif de cette section est d'exprimer les traces par unité de volume définissant, en (2.3) et (2.9) respectivement, la pression et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini en fonction des dérivées partielles (par rapport à l'intensité du champ magnétique) du noyau intégral de la résolvante à volume fini. En particulier, on prouve le Corollaire 4.3. On utilisera pour cela l'expression des dérivées partielles obtenue à partir de la théorie des perturbations magnétiques régularisée (cf. Théorème 4.2) puisque celle-ci a l'avantage de fournir une estimation sur les traces de l'ordre de L^3 au plus.
Ceci s'avérera d'une importance capitale pour la méthode développée dans le chapitre 5.

Soient $\beta > 0$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ (les domaines définis en (2.1)) et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type (2.14) inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir Lemme 2.6. En tant qu'opérateurs à trace sur $L^2(\Lambda_L)$ (voir Théorème 2.2), introduisons :

$$\frac{\partial^n \mathcal{I}_L}{\partial \omega^n}(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega_0)}) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \frac{\partial^n R_L}{\partial \omega^n}(\omega_0, \xi) \quad (4.56)$$

où $(\partial_\omega^n R_L)(\omega_0,\xi)$, $n\in\mathbb{N}^*$, est défini en (4.5) ; et par convention $(\partial_\omega^0 R_L)(\omega_0,\xi)=R_L(\omega_0,\xi)$.

Basé sur le Théorème 4.1, on prouve d'abord le résultat suivant :

Proposition 4.15. *Soient $\beta>0$ et $\omega_0\in\mathbb{R}$. Soient $z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K\subset\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un sous-ensemble compact tel que $z\in K$. Alors :*
(i). Pour tout $n\in\mathbb{N}$, $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est un opérateur intégral.
(ii). Son noyau intégral $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ et est défini par :

$$\frac{\partial^n\mathcal{I}_L}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega_0,z,\epsilon):=\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\frac{\partial^n R_L^{(1)}}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\quad \textit{quand } \mathbf{x}\neq\mathbf{y} \tag{4.57}$$

$$\frac{\partial^n\mathcal{I}_L}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega_0,z,\epsilon):=\frac{i}{2\pi}\left(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\frac{\partial^n R_L^{(1)}}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{4.58}$$

avec $(\partial_\omega^0 R_L^{(1)})(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)=R_L^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ et $(\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$, $n\in\mathbb{N}^*$, défini en (4.6). De plus, pour tout entier $n\geq 0$, il existe une constante $c_n=c(\beta,K,n)>0$ telle que :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\Lambda_L\times\Lambda_L,\quad \frac{1}{n!}\left|\frac{\partial^n\mathcal{I}_L}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega_0,z,\epsilon)\right|\leq c_nL^n(1+|\omega_0|)^{3n} \tag{4.59}$$

Preuve** (i) **Proposition 4.15
Il suffit de montrer que $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$, $n\in\mathbb{N}$, est borné de $L^2(\Lambda_L)\to L^\infty(\Lambda_L)$.
La présence de l'intégrale par rapport à la variable ξ dans (4.56) nécessite de connaître explicitement la dépendance en ξ dans les constantes $c^{'}(|\xi|)$ et $c^{''}(|\xi|)$ en (4.27) et (4.28). En vertu des Propositions 3.1 et 3.3 respectivement, il existe un réél $\delta>0$ suffisamment petit et un polynôme $p(\cdot\,)$ tels que :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad |R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)|\leq p(|\xi|)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y} \tag{4.60}$$

$$|S_{i,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)|\leq p(|\xi|)L^i(1+|\omega_0|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}\quad i\in\{1,2\} \tag{4.61}$$

Les constantes $c^{'}(|\xi|)$ et $c^{''}(|\xi|)$ peuvent donc être remplacées par des polynômes $p(|\xi|)$ pour tout $\xi\in\Gamma_K$. A partir de (4.56), en utilisant ces deux estimations et la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ sur le contour Γ_K (voir Lemme 2.7), il existe un autre polynôme $p_n(|\xi|)$ tel que :

$$\frac{1}{n!}\left\|\frac{\partial^n\mathcal{I}_L}{\partial\omega^n}(\beta,\omega_0,z,\epsilon)\right\|_{2,\infty}\leq L^n(1+|\omega_0|)^{3n}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,p_n(|\xi|)|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|<+\infty$$

La notation $p_n(|\xi|)$ siginifie ici que le degré du polynôme est de la forme κn, avec $\kappa>0$.
Le théorème de Dunford-Pettis (voir par ex. [106]) assure que $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est un opérateur intégral dans le sens : pour tout $\varphi\in L^2(\Lambda_L)$ et pour presque tout $\mathbf{x}\in\Lambda_L$,

$$\big((\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x})=\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\,(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega_0,z,\epsilon)\varphi(\mathbf{y})$$

Identifions maintenant ce noyau. Soit $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Lambda_L)$. En vertu de (4.56) :

$$\begin{aligned}\big((\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) &= \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\big((\partial_\omega^n R_L)(\omega_0,\xi)\varphi\big)(\mathbf{x}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\Lambda_L \\ &= \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\,(\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \qquad (4.62)\end{aligned}$$

En reprenant les arguments de la preuve de (4.7) avec les estimations (4.60) et (4.61) (il suffit de remplacer toutes les constantes par des polynômes $p(|\xi|)$), on montre que pour tout $n\in\mathbb{N}$, il existe $c_n = c(n) > 0$ et un autre polynôme $p_n(\cdot)$ tels que $\forall\,\xi\in\Gamma_K$:

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L,\quad \frac{1}{n!}\left|\frac{\partial^n R_L^{(1)}}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right| \le p_n(|\xi|)L^n(1+|\omega_0|)^{3n}\frac{\mathrm{e}^{-c(n)\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{4.63}$$

avec $\delta > 0$ suffisamment petit. Puis en utilisant la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot)$ sur le contour Γ_K, l'estimation (4.63) permet d'obtenir :

$$\begin{aligned}\text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\Lambda_L,\quad &\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\,|(\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y})| \\ &\le n!\|\varphi\|_\infty L^n(1+|\omega_0|)^{3n}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,p_n(|\xi|)|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\frac{\mathrm{e}^{-c(n)\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \\ &\le n!\|\varphi\|_\infty L^n(1+|\omega_0|)^{3n}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,p_n'(|\xi|)|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)| < +\infty\end{aligned}$$

où on a utilisé $\sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\frac{\mathrm{e}^{-c(n)\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = (\frac{1+|\xi|}{c(n)\delta})^2$ (voir par ex. [1]).
Le théorème de Tonelli assure alors l'intervertion des intégrales dans (4.62), et pour presque tout $\mathbf{x}\in\Lambda_L$ on a l'identité :

$$\big((\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{y}\left(\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)(\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\varphi(\mathbf{y})\right) \tag{4.64}$$

qui peut être étendue par continuité, $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ étant borné, $\forall\,\varphi\in L^2(\Lambda_L)$.

■

Sans modifier la définition (4.56) de l'opérateur $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$, en raison d'une part de l'estimation (4.63) et d'autre part de la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot)$ sur le contour Γ_K, la seule chose qu'on puisse prouver est que $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est continu en dehors de la diagonale D_L et obéit à une estimation du type :

$$\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L,\quad \frac{1}{n!}\left|\frac{\partial^n\mathcal{I}_L}{\partial\omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega_0,z,\epsilon)\right| \le \frac{c_n L^n(1+|\omega_0|)^{3n}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$$

pour une constante numérique $c_n = c(\beta,K,n) > 0$.

La méthode utilisée pour prouver la continuité sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ de $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ consiste à faire apparaître une résolvante supplémentaire dans l'expression (4.5). Pour cela, il suffit de faire une intégration par parties par rapport à la variable ξ dans (4.56).

Pour la suite, on a besoin du lemme suivant (sa preuve se trouve en annexe) :

Lemme 4.16. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$, $\epsilon = \pm 1$, un compact. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type (2.14) inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir Lemme 2.6.*
Alors toute primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ est également holomorphe sur le domaine $\mathfrak{D}$.
De plus, parmi ces primitives, on peut toujours en choisir une exponentiellement décroissante sur le contour Γ_K, i.e. il existe $F_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ et une constante $c(\beta, K) > 0$ tels que :

$$\forall\, z \in K,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K) \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi} \tag{4.65}$$

Et pour tout polynôme $p(|\xi|)$, il existe une autre constante $c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\forall\, z \in K, \quad \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi||p(|\xi|)||F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K) < +\infty \tag{4.66}$$

Preuve** (ii) **Proposition 4.15
On commence par prouver le cas particulier $n = 0$.
Considérons l'opérateur $(\partial_\omega^0 \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon) := \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega_0)})$. Soit $F_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ choisie comme dans le Lemme 4.16. Puisque le contour Γ_K est inclus dans le domaine d'holomorphie de $F_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ $\forall\, z \in K$, par une intégration par parties :

$$(\partial_\omega^0 \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L(\omega_0, \xi) = -\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L^2(\omega_0, \xi)$$

Par identification (voir méthode page précédente), le noyau intégral de $(\partial_\omega^0 \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ peut encore s'écrire :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L, \quad (\partial_\omega^0 \mathcal{I}_L)(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) = -\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

où $R_L^{(2)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$ est le noyau intégral de $R_L^2(\omega_0, \xi)$. Puisque $R_L^{(2)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$ est continu et uniformément borné, pour tout $\xi \in \Gamma_K$, par un polynôme $p(|\xi|)$ (voir Corollaire 3.2), le théorème de continuité sous le signe intégrale assure que $(\partial_\omega^0 \mathcal{I}_L)(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega_0, z, \epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ et uniformément borné par une constante $c_0 = c(\beta, K) > 0$.

Prouvons maintenant que pour tout entier $n \geq 1$, le noyau $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega_0, z, \epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$. Par une intégration par parties par rapport à la variable ξ dans (4.56) compte-tenu de (4.5), pour tout $n \geq 1$, $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ peut également s'écrire comme :

$$\begin{aligned}(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon) = -n! \frac{i}{2\pi} \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \sum_{i_j \in \{1,2\}^k} \chi_k^n(i_1, \ldots, i_k) \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L(\omega_0, \xi) \cdot \\ \cdot \Big(J_{k,L}(i_1, \ldots, i_k)(\omega_0, \xi) + \sum_{m=1}^{k} S_{i_1,L}(\omega_0, \xi) \cdots \hat{S}_{i_m,L}(\omega_0, \xi) \cdots S_{i_k,L}(\omega_0, \xi) \Big)\end{aligned} \tag{4.67}$$

où $\hat{S}_{i_m,L}(\omega_0, \xi)$, avec $i_m \in \{1, 2\}$, désignent les opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$ définis par :

$$\hat{S}_{1,L}(\omega_0, \xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot (i\nabla + \omega_0 \mathbf{a}(\mathbf{x})) R_L^2(\omega_0, \xi), \quad \hat{S}_{2,L}(\omega_0, \xi) := \frac{1}{2} \mathbf{a}^2(\mathbf{x}) R_L^2(\omega_0, \xi)$$

Ces deux opérateurs sont générés par leur noyau intégral défini respectivement par :

$$\begin{aligned}\forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L,\quad \hat{S}_{1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) &:= \mathbf{a}(\mathbf{x})\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega_0\mathbf{a}(\mathbf{x}))R_L^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\\ \forall\,(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\Lambda_L\times\Lambda_L,\quad \hat{S}_{2,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi) &:= \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x})R_L^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\end{aligned}\tag{4.68}$$

Clairement $\hat{S}_{2,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est continu sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ alors que $\hat{S}_{1,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est continu en dehors de la diagonale D_L. Pour le voir, il suffit d'utiliser le Lemme 3.20 étant donné que :

$$\hat{S}_{1,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)=\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,S_{1,L}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)R_L^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Par ailleurs, il existe un réél $\delta>0$ suffisamment petit et un polynôme $p(\cdot\,)$ tels que :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad |\hat{S}_{i,L}(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega_0,;\xi)|\leq p(|\xi|)L^i(1+|\omega_0|)^3\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\quad i\in\{1,2\}\tag{4.69}$$

Partant de (4.67), le noyau intégral de $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est défini d'abord en dehors de la diagonale D_L par :

$$\begin{aligned}(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega_0,z,\epsilon)=-n!\frac{i}{2\pi}\sum_{k=1}^n(-1)^k\sum_{i_j\in\{1,2\}^k}\chi_k^n(i_1,\dots,i_k)\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot\\ \cdot\left(\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)+\right.\\ \left.+\sum_{m=1}^k\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)\hat{I}_{k,L}^m(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right)\end{aligned}\tag{4.70}$$

où $J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ est défini en (4.30) ; et avec la convention $\mathbf{z}_0:=\mathbf{z}$, $\mathbf{z}_k:=\mathbf{y}$:

$$\begin{aligned}\hat{I}_{k,L}^m(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi):=\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_{k-1}\,S_{i_1,L}(\mathbf{z},\mathbf{z}_1;\omega_0,\xi)\cdots\\ \cdots\hat{S}_{i_m,L}(\mathbf{z}_{m-1},\mathbf{z}_m;\omega_0,\xi)\cdots S_{i_k,L}(\mathbf{z}_{k-1},\mathbf{y};\omega_0,\xi),\quad m\in\{1,\dots,k\}\end{aligned}\tag{4.71}$$

La continuité sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ de $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est une conséquence du Lemme 3.21. En effet, en raison de l'estimation (4.31), le Lemme 3.21 assure que la fonction $(\mathbf{x},\mathbf{y})\mapsto\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ est continue sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$.
Par ailleurs, il existe un polynôme $p_k(\cdot\,)$ tel que uniformément en $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda_L$:

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)J_{k,L}(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)|\leq p_k(|\xi|)L^{i_1+\cdots+i_k}(1+|\omega_0|)^{3k}\tag{4.72}$$

La continuité de $(\mathbf{x},\mathbf{y})\mapsto\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega_0,\xi)\hat{I}_{k,L}^m(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)$ sur $\Lambda_L\times\Lambda_L$ est assurée par la présence d'un noyau du type $\hat{S}_{i_m,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ dans l'expression de $\hat{I}_{k,L}^m(i_1,\dots,i_k)(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$ puisqu'il permet d'obtenir une estimation de la forme :

$$|\hat{I}_{k,L}^m(i_1,\dots,i_k)(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega_0,\xi)|\leq p_k(|\xi|)L^{i_1+\cdots+i_k}(1+|\omega_0|)^{3k}\frac{\mathrm{e}^{-c\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{y}|}\quad\mathbf{z}\neq\mathbf{y}\tag{4.73}$$

pour un autre polynôme $p_k(\cdot)$, avec $c = c(k) > 0$ et $\delta > 0$ suffisamment petit.
Par conséquent, il existe un autre polynôme $p_k(\cdot)$ tel que uniformément en $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_L$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega_0, \xi) \hat{I}_{k,L}^m(i_1, \ldots, i_k)(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)| \leq p_k(|\xi|) L^{i_1+\cdots+i_k} (1+|\omega_0|)^{3k} \tag{4.74}$$

Les estimations (4.72) et (4.74) ainsi que la décroissance exponentielle de $F_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ sur Γ_K permettent d'obtenir d'une part que $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega_0, z, \epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ par le théorème de continuité sous le signe intégrale et d'autre part l'estimation (4.59).
Notons que d'après (4.64), le noyau intégral de $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$ s'écrit également :

$$(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) (\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$$

Comme $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega_0, z, \epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ en vertu des arguments ci-dessus, cela signifie que l'intégration par rapport à la variable ξ de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)(\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \cdot)$ fait disparaître la singularité sur la diagonale des dérivées partielles du noyau de la résolvante :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \Lambda_L, \quad (\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \left(\int_{\Gamma_K} \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) (\partial_\omega^n R_L^{(1)})(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \right) \Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$$

■

Remarquons que la borne supérieure sur $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega_0, z, \epsilon)$ fournie par (4.59) est de l'ordre de L^n. Il s'ensuit qu'une borne supérieure de sa trace sera de l'ordre de L^{n+3}. Cependant, pour les besoins du chapitre 5, on souhaite une borne supérieure de l'ordre de L^3 au plus. C'est là que le développement régularisé de la section 3 trouve son intérêt.

Basé sur les résultats du Théorème 4.2, on établit :

Proposition 4.17. *Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega_0))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$.*
Alors le noyau diagonal de l'opérateur $(\partial_\omega^n \mathcal{I}_L)(\beta, \omega_0, z, \epsilon)$, $n \in \mathbb{N}^*$, peut s'écrire :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \Lambda_L, \quad \frac{\partial^n \mathcal{I}_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) = n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^n \mathcal{T}_{k,L}^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega_0, \xi) \tag{4.75}$$

où $\mathcal{T}_{k,L}^m(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$, avec $m \in \mathbb{N}$, est la fonction continue définie en (4.14).
De plus, pour tout entier $n \geq 0$, il existe une constante $c_n = c(\beta, K, n) > 0$ telle que uniformément en $L \geq 1$:

$$\forall\, \mathbf{x} \in \Lambda_L, \quad \frac{1}{n!} \left| \frac{\partial^n \mathcal{I}_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) \right| \leq c_n (1 + |\omega_0|)^{3n} \tag{4.76}$$

Preuve Proposition 4.17
A partir de (4.58) et compte-tenu de (4.15), il vient pour tout $\mathbf{x} \in \Lambda_L$:

$$\frac{\partial^n \mathcal{I}_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega_0, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \big(i\phi(\mathbf{x}, \mathbf{x})\big)^n \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \right) \Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} +$$
$$+ n! \frac{i}{2\pi} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^n \mathcal{T}_{k,L}^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \right) \Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$$

Comme $\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}) = 0$ et que $\mathcal{T}^m_{k,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega_0,\xi)$, avec $m \in \mathbb{N}$, est une fonction continue ; on obtient directement (4.75). Enfin, en faisant apparaître la dépendance explicite en $|\xi|$ dans les constantes intervenant dans la preuve de l'estimation (4.16), on prouve l'existence de deux polynômes $p_k(\cdot\,)$ et $q_n(\cdot\,)$ tels que uniformément en $L \geq 1$ et $\mathbf{x} \in \Lambda_L$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |\mathcal{T}^{n-k}_{k,L}(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega_0,\xi)| \leq p_k(|\xi|)q_n(|\xi|)(1+|\omega_0|)^{3n}$$

Il reste à utiliser la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ sur Γ_K pour obtenir (4.76).

■

Preuve Corollaire 4.3
Considérons d'abord le cas de la pression grand-canonique à volume fini défini en (2.3). Puisque l'opérateur $(\partial^0_\omega \mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega_0)})$ est à trace et que son noyau $(\partial^0_\omega \mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ (voir (ii) Proposition 4.15), il vient :

$$\begin{aligned} P_L(\beta,\omega_0,z,\epsilon) &= \frac{\epsilon}{\beta L^3}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \frac{\partial^0 \mathcal{I}_L}{\partial \omega^0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega_0,z,\epsilon) \\ &= \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega_0,\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \end{aligned}$$

Le cas de la densité grand-canonique se déduit immédiatement de l'expression ci-dessus en utilisant le fait que $\rho_L(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \beta z(\partial_z P_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon)$.
Considérons enfin le cas des susceptibilités grand-canonique à volume fini définies en (2.9). Puisque l'opérateur $(\partial^n_\omega \mathcal{I}_L)(\beta,\omega_0,z,\epsilon) := \frac{\partial^n}{\partial\omega^n}\ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega_0)})$, $n \in \mathbb{N}^*$, est à trace et que son noyau $(\partial^n_\omega \mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega_0,z,\epsilon)$ est continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$ (voir (ii) Proposition 4.15) :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}^n_L(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta L^3}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \frac{\partial^n \mathcal{I}_L}{\partial \omega^n}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega_0,z,\epsilon)$$

Il reste à insérer l'expression du noyau diagonal en (4.75) pour obtenir :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}^n_L(\beta,\omega_0,z,\epsilon) = n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \sum_{k=1}^{n} \mathcal{T}^{n-k}_{k,L}(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega_0,\xi)$$

où on a utilisé le théorème de Tonelli, justifié par l'estimation (4.76), pour intervertir la trace avec l'intégrale sur le contour Γ_K.

■

On démontre maintenant le Corollaire 4.4. Sa preuve repose essentiellement sur le lemme suivant (la preuve est en annexe) :

Lemme 4.18. *Pour tout $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$, $\omega \mapsto P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est une fonction paire. Même chose pour $\omega \mapsto \rho_L(\beta,\omega,z,\epsilon)$.*

Preuve Corollaire 4.4.
Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$. Etant donné que la fonction $P_L(\beta,\cdot\,,z,\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur un intervalle centré en $\omega = 0$, on peut écrire son développement de Taylor :

$$\begin{aligned} &P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = \\ &\quad P_L(\beta,0,z,\epsilon) + \omega\frac{\partial P_L}{\partial\omega}(\beta,0,z,\epsilon) + \frac{\omega^2}{2}\frac{\partial^2 P_L}{\partial\omega^2}(\beta,0,z,\epsilon) + \frac{\omega^3}{3!}\frac{\partial^3 P_L}{\partial\omega^3}(\beta,0,z,\epsilon) + \mathcal{O}(\omega^4) \end{aligned}$$

La fonction $P_L(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)$ étant paire (cf. Lemme 4.18), par conséquent :

$$\frac{\partial P_L}{\partial \omega}(\beta, 0, z, \epsilon) = 0 = \frac{\partial^3 P_L}{\partial \omega^3}(\beta, 0, z, \epsilon)$$

■

5 Annexe

Preuve Lemme 4.14.
Soient $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Lambda_L \times \Lambda_L$. Soit $k \geq 1$ un entier et pour tout $m \in \mathbb{N}$, soit $\mathcal{T}^m_{k,L}(\cdot\,, \cdot\,; \omega_0, \xi)$ la fonction définie en (4.14). Pour $n \geq k \geq 1$ un entier, soit $h[n]$ l'hypothèse de récurrence :

$$h[n] : \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=1}^{k} \mathcal{T}^{k-m}_{m,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.77}$$

$h[1]$ est vraie puisque les membres de gauche et de droite donnent $(\delta\omega)\mathcal{T}^0_{1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$.
Supposons $h[n]$ vraie et montrons $h[n+1]$:

$$\sum_{k=1}^{n+1} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n+1-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) +$$
$$+ \sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k (\delta\omega)^{n+1-k} \mathcal{T}^{n+1-k}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) + (\delta\omega)^{n+1} \mathcal{T}^0_{n+1,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

Puis en rassemblant les deux derniers termes, on obtient :

$$\sum_{k=1}^{n+1} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n+1-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) =$$
$$\sum_{k=1}^{n} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) + (\delta\omega)^{n+1} \sum_{k=1}^{n+1} \mathcal{T}^{n+1-k}_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) \tag{4.78}$$

Enfin, en utilisant l'hypothèse de récurrence (4.77) dans le premier terme du membre de droite de l'égalité (4.78), il vient :

$$\sum_{k=1}^{n+1} (\delta\omega)^k \sum_{m=0}^{n+1-k} (\delta\omega)^m \mathcal{T}^m_{k,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi) = \sum_{k=1}^{n+1} (\delta\omega)^k \sum_{m=1}^{k} \mathcal{T}^{k-m}_{m,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega_0, \xi)$$

■

Preuve Lemme 4.16.
Soient $\beta > 0$ et $\omega_0 \in \mathbb{R}$. Soit $\alpha(\omega_0)$ un réél vérifiant $-\infty < \alpha(\omega_0) < E_0(\omega_0)$.
Soient $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha(\omega_0))$ un compact et $\eta_K > 0$, $\xi_K > E_0(\omega_0)$ les réels du Lemme 2.6.
Soit $\mathfrak{D}$ le domaine sur lequel $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$ est holomorphe, voir (2.13).
Soit $\varsigma \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right)$. Soit Γ_K le contour orienté positivement et inclus dans $\mathfrak{D}$ défini par :

$$\Gamma_K := \left\{\Re\xi = \alpha(\omega_0),\ \Im\xi \in \left[-\frac{\eta_K}{2\beta}, \frac{\eta_K}{2\beta}\right]\right\} \cup \left\{\Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K),\ \Im\xi = \pm\frac{\eta_K}{2\beta}\right\} \cup$$
$$\cup \left\{\Re\xi \geq \xi_K,\ \arg\left(\xi - \xi_K \mp i\frac{\eta_K}{2\beta}\right) = \pm\varsigma\right\}$$

Par la suite, on posera $\eta = \eta(\beta) := \frac{\eta_K}{2\beta}$ et on utilisera la détermination principale du logarithme définie en (2.83) pour les estimations.

La seule chose à faire est de construire une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ vérifiant (4.65). (4.66) sera alors automatiquement vérifiée, voir preuve Lemme 2.7 dans l'annexe du chapitre 2. Considérons la primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ définie de la manière suivante :

$$\forall\, z \in K, \quad F_\epsilon(\beta, z; \xi) := \int_0^\xi \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; u) - \frac{1}{\beta}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\, \ln(1 + \epsilon z u_1) \tag{4.79}$$

La fonction $\xi \mapsto F_\epsilon(\beta, z; \xi)$ est clairement holomorphe sur le domaine $\mathfrak{D}$ pour tout $z \in K$. A noter que la constante dans (4.79) a été choisie *a posteriori* pour obtenir (4.65).
On commence par écrire (4.79) sous la forme suivante :

$$F_\epsilon(\beta, z; \xi) = \int_0^{\Re\xi} \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; u) - \frac{1}{\beta}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\, \ln(1 + \epsilon z u_1) + \int_{\Re\xi}^{\Re\xi + i\Im\xi} \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; u) \tag{4.80}$$

En utilisant les changements de variable $X := \mathrm{e}^{-\beta u}$ dans la première intégrale et $Y := i^{-1}(u - \Re\xi)$ dans la dernière intégrale du membre de droite de (4.80), il vient :

$$F_\epsilon(\beta, z; \xi) = -\frac{1}{\beta}\int_0^{\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}} \frac{\mathrm{d}X}{X}\, \ln(1 + \epsilon z X) + i\int_0^{\Im\xi} \mathrm{d}Y\, \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta(\Re\xi + iY)}) \tag{4.81}$$

Soit $a = a(\beta, K) > 0$ un réél vérifiant $a < \min\Big((\sup_{z\in K}|z|)^{-1}, \mathrm{e}^{-\beta\xi_K}\Big)$ choisi assez petit.
Soit $\Re\xi = \alpha(\omega_0)$. Pour tout $\Im\xi \in [-\eta, \eta]$,

$$\begin{aligned}&\forall\, z \in K, \quad \big|F_\epsilon(\beta, z; \alpha(\omega_0) + i\Im\xi)\big| \leq \\ &\left(\beta^{-1}\left[\sup_{z\in K}|z| + \frac{\pi}{a} + \frac{2\sup_{z\in K}|z|}{1 - a\sup_{z\in K}|z|}\right] + \eta\sup_{z\in K}|z| + \eta\pi\mathrm{e}^{\beta\alpha(\omega_0)}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\alpha(\omega_0)}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\alpha(\omega_0)}\end{aligned} \tag{4.82}$$

Soit $\Im\xi = \pm\eta$. Pour tout $\Re\xi \in [\alpha(\omega_0), \xi_K)$,

$$\begin{aligned}&\forall\, z \in K, \quad \big|F_\epsilon(\beta, z; \Re\xi \pm i\eta)\big| \leq \\ &\quad\left(\beta^{-1}\left[\sup_{z\in K}|z| + \frac{\pi}{a} + \frac{2\sup_{z\in K}|z|}{1 - a\sup_{z\in K}|z|}\right] + \eta\sup_{z\in K}|z| + \eta\pi\mathrm{e}^{\beta\xi_K}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\alpha(\omega_0)}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi}\end{aligned} \tag{4.83}$$

Pour $\Re\xi = \xi_K + r\cos\varsigma$ et $\Im\xi = \pm(\eta + r\sin\varsigma)$, avec $r \in (0, +\infty)$ et $\varsigma \in [0, \pi/2)$,

$$\begin{aligned}&\forall\, z \in K, \quad \big|F_\epsilon(\beta, z; \Re\xi + i\Im\xi)\big| \leq \\ &\qquad\qquad \big(\beta^{-1} + \eta + r\big)\sup_{z\in K}|z|\left[1 + \frac{2}{1 - \sup_{z\in K}|z|\mathrm{e}^{-\beta\xi_K}}\right]\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi}\end{aligned} \tag{4.84}$$

Il reste à utiliser dans (4.84) d'une part que $(\beta^{-1} + \eta)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi} \leq (\beta^{-1} + \eta)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\xi_K}$, et d'autre part que $r\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi} \leq r\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}r\cos\varsigma}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\xi_K} \leq \big(\frac{2}{e\beta\cos\varsigma}\big)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\xi_K}$.
Les estimations (4.82), (4.83) et (4.84) donnent l'existence d'une constante $c(\beta, K) > 0$ telle que pour tout $\xi \in \Gamma_K$ et pour tout $z \in K$, $|F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c(\beta, K)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}\Re\xi}$, d'où (4.65).

■

Preuve Lemme 4.18.
Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$ un compact tel que $z \in K$. A partir de l'expression (4.17) de la pression grand-canonique à volume fini :

$$\overline{P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)} = \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{-i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \overline{\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}) R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)}\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$$

Comme l'axe réél est un axe de symétrie pour le contour Γ_K (voir par ex. [26]) :

$$\begin{aligned}\overline{\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi}) R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)} &= -\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \overline{\ln(1+\epsilon \overline{z} \mathrm{e}^{-\beta\overline{\xi}}) R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})} \\ &= -\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})\overline{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})}\end{aligned}$$

Il s'ensuit alors que :

$$\overline{P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)} = \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})\overline{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})}\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{4.85}$$

Utilisons maintenant qu'au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$:

$$(\overline{H_L(\omega)} - \xi)^{-1} = (H_L(-\omega) - \xi)^{-1}$$

On obtient alors au sens des distributions :

$$\overline{(H_L(\omega) - \overline{\xi})^{-1} R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = (H_L(-\omega)-\xi)^{-1}\overline{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})}$$

d'où l'on déduit :

$$R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};-\omega,\xi) = \overline{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})}, \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Par conséquent, compte-tenu de (4.85) :

$$P_L(\beta,-\omega,z,\epsilon) = \overline{P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)} \tag{4.86}$$

Par ailleurs, en utilisant qu'au sens des opérateurs bornés sur $L^2(\Lambda_L)$:

$$\left((H_L(\omega)-\xi)^{-1}\right)^* = (H_L(\omega)-\overline{\xi})^{-1}$$

puis que $\left((H_L(\omega)-\xi)^{-1}\right)^*$ a pour noyau intégral $\overline{R_L^{(1)}(\mathbf{y},\mathbf{x};\omega,\xi)}$ (voir par ex. [60]), on a :

$$R_L^{(1)}(\mathbf{y},\mathbf{x};\omega,\xi) = \overline{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\overline{\xi})}, \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

D'où l'on déduit, compte-tenu de (4.85) :

$$P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = \overline{P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)} \tag{4.87}$$

En réunissant (4.86) et (4.87), on obtient que $P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = P_L(\beta,-\omega,z,\epsilon)$.
Enfin, en vertu de (4.18) :

$$\rho_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{1}{L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z+\epsilon}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$$

Les arguments utilisés ci-dessus restant inchangés lorsqu'on remplace $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)$ par $\xi \mapsto (\mathrm{e}^{\beta\xi}/z+\epsilon)^{-1}$, alors on a également $\rho_L(\beta,\omega,z,\epsilon) = \rho_L(\beta,-\omega,z,\epsilon)$.

■

Chapitre 5

Limites thermodynamiques

Considérons les grandeurs grand-canonique à volume fini, caractéristiques de la réponse (dia)magnétique du gaz quantique confiné, définies dans le Corollaire 4.3 (sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3'**), cf. page 70). Notons $\mathcal{G}_L(\beta, \omega, z, \epsilon)$ une de ces grandeurs. On dit qu'elle admet la limite thermodynamique (voir [95]) s'il existe $\mathcal{G}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ tel que :

$$\mathcal{G}_L(\beta, \omega, z, \epsilon) = \mathcal{G}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad \text{pour } L \text{ suffisamment grand} \tag{5.1}$$

$\mathcal{G}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est obtenue lorsque $\Lambda_L = (-\frac{L}{2}\frac{L}{2})^3$ remplit l'espace tout entier dans un sens qui sera précisé ultérieurement. Etant indépendante des effets de bords liés au confinement, la limite thermodynamique caractérise donc *les propriétés (dia)magnétiques intrinsèques du gaz dans le milieu considéré* (modélisé par le potentiel d'origine électrique).

La majeure partie de ce chapitre est consacrée à l'étude des limites thermodynamiques de ces grandeurs dans le cas particulier où le potentiel V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique, avec $\boldsymbol{\Upsilon}$ un réseau (non dégénéré) dans $\mathbb{R}^3$. Un tel potentiel permet de modéliser, dans l'approximation à un corps, l'interaction de chaque particule avec le champ cristallin d'un solide infini[1] parfait (i.e. un réseau où tous les sites sont occupés par des ions immobiles de même nature) de réseau de Bravais $\boldsymbol{\Upsilon}$. Ainsi ce modèle couvre le cas d'un gaz d'électrons de conduction.

Sous ces hypothèses, on montre l'existence des limites thermodynamiques et on étudie leurs propriétés (analycité par rapport à la variable z, régularité par rapport à ω, régularité jointe en (ω, z) et intervertion des limites avec les dérivations). Les corrections de surface, correspondant au coefficient en facteur de $1/L$ dans (5.1), ne seront pas abordées ici.

Ce chapitre comporte également trois appendices. Le premier est une extension des résultats obtenus sous l'hypothèse où V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique. On y étudie les limites thermodynamiques dans le cas où la densité de particules devient un paramètre extérieur fixé.
Dans le deuxième appendice, on considère un potentiel type Anderson permettant de modéliser l'interaction de chaque particule avec le champ cristallin d'un solide désordonné, type alliage. Seule l'existence des limites thermodynamiques sera abordée.
Dans le troisième appendice, on se propose de retrouver des résultats de [4], [6], [16] concernant le gaz parfait (i.e. $V = 0$). On établit des formules en terme des fonctions de Bose et de Fermi pour les limites thermodynamiques lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle. Dans la limite des faibles températures, on retrouve la "formule de Landau" comme contribution diamagnétique dominante à la susceptibilité magnétique en champ nul.

[1] L'hypothèse d'un réseau infini est acceptable compte-tenu des faibles dimensions atomiques comparées à "la taille" d'un solide.

Excepté dans les appendices 2 et 3, on omet la dépendance explicite en V dans les notations. Comme dans les chapitres précédents, le cas $\epsilon = -1$ fera référence au gaz de bosons et le cas $\epsilon = +1$ fera référence au gaz de fermions.

1 Résultats principaux

Soient $\{e_i^{'}\}_i$ une base de $\mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{\Upsilon} = \oplus_{i=1}^3 \mathbb{Z}\mathbf{e}_i^{'}$ un réseau dans $\mathbb{R}^3$ (réseau de Bravais) et $\Omega := \{\sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i^{'} : -\frac{1}{2} \leq x_i < \frac{1}{2}\}$ la cellule unité du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$ (cellule de Wigner-Seitz).On suppose que V est une fonction à valeurs réélles $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique et $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, $\epsilon_0 > 0$. Soit $H_\infty(\omega) = H_\infty(\omega, V)$, $\omega \in \mathbb{R}$, l'Hamiltonien à une particule sur l'espace tout entier. Soit $D_\infty := \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \,:\, \mathbf{x} = \mathbf{y}\}$ la diagonale dans $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Pour $\xi \in \rho(H_\infty(\omega))$, soit $R^{(1)}_\infty(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi) : (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \setminus D_\infty \to \mathbb{C}$ le noyau intégral de $R_\infty(\omega, \xi) := (H_\infty(\omega) - \xi)^{-1}$.

Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, avec $E_0(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega))$ et $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ les domaines du plan complexe définis en (2.1). Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Γ_K désignera un contour orienté positivement du type (2.14) inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir (2.13).

A partir de l'expression (4.17) de la pression grand-canonique à volume fini et compte-tenu de la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de V, introduisons le candidat à la limite thermodynamique :

$$P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \frac{i}{2\pi} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi \, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi) \right) \Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{5.2}$$

où Ω est la cellule de Wigner-Seitz du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$ et χ_Ω la fonction indicatrice de Ω.
Le candidat à la limite thermodynamique est bien défini en vertu de la Proposition 5.15.

Voici le premier résultat de convergence uniforme établi dans ce chapitre :

<u>Théorème</u> 5.1. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Alors pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$,*

$$\lim_{L \to \infty} \sup_{z \in K} |P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) - P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

où $\{P_L(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)\}_{L \geq 1}$ est la suite de fonctions définies en (4.17).

En vertu du Théorème de Weierstrass, voir Théorème 5.17, on a le corollaire :

<u>Corollaire</u> 5.2. *Pour tout $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$, $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)) \ni z \mapsto P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est analytique. De plus, pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$,*

$$\forall\, m \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L \to \infty} \sup_{z \in K} \left| \frac{\partial^m P_L}{\partial z^m}(\beta, \omega, z, \epsilon) - \frac{\partial^m P_\infty}{\partial z^m}(\beta, \omega, z, \epsilon) \right| = 0$$

Le cas de la densité grand-canonique s'obtient directement à partir du Corollaire 5.2. Avec $\{\rho_L(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)\}_{L \geq 1}$ la suite de fonctions définies en (4.18) et en posant :

$$\rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \beta z \frac{\partial P_\infty}{\partial z}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Omega|} \frac{i}{2\pi} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi \, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon} R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi) \right) \Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \tag{5.3}$$

$$\forall\, K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)), \quad \lim_{L \to \infty} \sup_{z \in K} |\rho_L(\beta, \omega, z, \epsilon) - \rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

La définition des candidats à la limite thermodynamique pour les susceptibilités généralisées grand-canonique nécessite d'introduire de nouvelles notations.
Pour tout $\xi \in \rho(H_\infty(\omega))$, soient $T_{1,\infty}(\omega,\xi)$ et $T_{2,\infty}(\omega,\xi)$ les opérateurs bornés sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ générés par leur noyau intégral respectif continu sur $(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \setminus D_\infty$ défini par :

$$T_{1,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) := \mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot (i\nabla_{\mathbf{x}} + \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) \tag{5.4}$$

$$T_{2,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) := \frac{1}{2}\mathbf{a}^2(\mathbf{x}-\mathbf{y})R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) \tag{5.5}$$

A partir de l'expression (4.19) et compte-tenu de la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de V, les candidats à la limite thermodynamique pour les susceptibilités grand-canonique sont définis par :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}^n_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) := n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{i}{2\pi}\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \cdot$$
$$\cdot \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi^k_j(i_1,\dots,i_j)\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!}R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\xi)\cdot$$
$$\cdot\, T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\xi)\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\xi)T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\xi) \tag{5.6}$$

avec la convention $0^0 = 1$; pour tout $j \in \mathbb{N}^*$, Fl_j est défini en (4.11) et pour tout entier $k \geq j \geq 1$, $\chi^k_j(i_1,\dots,i_j)$ est la fonction caractéristique définie en (4.3).
Les candidats à la limite thermodynamique sont bien définis en vertu de la Proposition 5.26.

Avec $\mathcal{D}_\epsilon := \cap_{\omega\in\mathbb{R}}\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)) = \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$, voici le second résultat de convergence uniforme (ici énoncé dans sa version globale) établi dans ce chapitre :

<u>Théorème</u> 5.3. *Soit $\beta > 0$. Alors pour tout compact $[\omega_1,\omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$, et pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$:*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty}\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}|\mathcal{X}^n_L(\beta,\omega,z,\epsilon) - \mathcal{X}^n_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0$$

où $\{\mathcal{X}^n_L(\beta,\cdot,\cdot,\epsilon)\}_{L\geq 1}$ est la suite de fonctions définies en (4.19).

Le Théorème 5.3 admet pour corollaires :

<u>Corollaire</u> 5.4. *Pour tout $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon$, $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$. En particulier, pour tout $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, on a l'identification :*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \frac{\partial^n P_\infty}{\partial\omega^n}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \left(\frac{c}{q}\right)^n \mathcal{X}^n_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$$

De plus, $\forall\, z \in \mathcal{D}_\epsilon$ et uniformément sur les compacts $[\omega_1,\omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$:

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty}\frac{\partial^n P_L}{\partial\omega^n}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{\partial^n P_\infty}{\partial\omega^n}(\beta,\omega,z,\epsilon)$$

<u>Corollaire</u> 5.5. *Pour tout $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$, $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)) \ni z \mapsto \mathcal{X}^n_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est analytique. De plus, pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$,*

$$\forall\, m \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty}\sup_{z\in K}\left|\frac{\partial^{m+n}P_L}{\partial z^m\partial\omega^n}(\beta,\omega,z,\epsilon) - \frac{\partial^{m+n}P_\infty}{\partial z^m\partial\omega^n}(\beta,\omega,z,\epsilon)\right| = 0$$

Le dernier résultat de ce chapitre établit que la limite thermodynamique de la pression grand-canonique est une fonction lisse dans les variables (ω, z) jointement :

Théorème 5.6. *Pour $\beta > 0$, $\mathbb{R} \times (\mathcal{D}_\epsilon \cap \mathbb{R}) \ni (\omega, z) \mapsto P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$.*

Corollaire 5.7. *Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(0))$. Alors pour $\omega \in \mathbb{R}$ assez proche de 0 :*

$$P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) = P_\infty(\beta, 0, z, \epsilon) + \frac{\omega^2}{2}\left(\frac{c}{q}\right)^2 \mathcal{X}^2_\infty(\beta, 0, z, \epsilon) + \mathcal{O}(\omega^4)$$

En particulier, l'aimantation en champ magnétique nul est identiquement nulle :

$$\mathcal{X}^1_\infty(\beta, \omega = 0, z, \epsilon) = 0$$

Remarque 5.8. Les résultats du Théorème 5.1 et du Corollaire 5.2 seront également démontrés pour des potentiels singuliers du type $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$, voir paragraphe 3.2.

Remarque 5.9. Lorsque $\boldsymbol{\Upsilon} \equiv \mathbb{Z}^3$ par exemple, l'hypothèse $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, avec $\epsilon_0 > 0$, peut être remplacée par $\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\, |V(\mathbf{x})|^{3+\epsilon_0} < \infty$; ici Ω est le cube unité centré en l'origine. En effet, on peut munir $L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec la norme équivalente :

$$\|f\|_{p,\text{uloc}} \sim \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^3} \left(\int_{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|<1} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |f(\mathbf{y})|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad \infty > p \geq 1 \tag{5.7}$$

Remarque 5.10. Les Corollaires 5.2 et 5.4 assurent l'intervertion de la limite $L \to \infty$ avec les dérivées partielles par rapport à la variable z et la variable ω respectivement :

$$\lim_{L\to\infty} \frac{\partial^m P_L}{\partial z^m}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\partial^m}{\partial z^m}\big(\lim_{L\to\infty} P_L(\beta, \omega, z, \epsilon)\big) \quad m \in \mathbb{N}^*$$
$$\lim_{L\to\infty} \frac{\partial^n P_L}{\partial \omega^n}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\partial^n}{\partial \omega^n}\big(\lim_{L\to\infty} P_L(\beta, \omega, z, \epsilon)\big) \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Remarque 5.11. Réécriture des limites thermodynamiques en terme de trace.
La limite thermodynamique de la pression peut encore s'écrire (voir Remarque 5.16) :

$$P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\left\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi)\right\} \tag{5.8}$$

A partir des opérateurs $T_{1,\infty}(\omega, \xi)$ et $T_{2,\infty}(\omega, \xi)$ générés par les noyaux (5.4) et (5.5) respectivement, les limites thermodynamiques de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique[2] grand-canonique peuvent encore s'écrire (voir Remarques 5.21 et 5.25) :

$$\mathcal{X}^1_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\left\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi)\right\} \tag{5.9}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{X}^2_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := 2\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)\cdot \\ \cdot R_\infty(\omega, \xi)\big\{T_{1,\infty}(\omega, \xi)T_{1,\infty}(\omega, \xi) - T_{2,\infty}(\omega, \xi)\big\}\Big\}\end{aligned} \tag{5.10}$$

Chacune des intégrales d'opérateurs (par rapport à la variable ξ) ci-dessus possède un noyau jointement continu sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ (voir Propositions 5.15, 5.20 et 5.24).

Remarque 5.12. Les résultats ci-dessus ne permettent pas de conclure quant à l'existence ou non d'un voisinage complexe de l'axe réél sur lequel $\omega \mapsto P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ serait analytique.

[2] Il s'agit ici de la contribution, à la susceptibilité magnétique par unité de volume, liée aux moments magnétiques orbitaux des particules du gaz en l'absence de confinement (donc pas d'effets de bords).

2 Quelques mots sur la méthode utilisée

La première étape consiste à construire les candidats à la limite thermodynamique pour la pression grand-canonique et les susceptibilités généralisées grand-canonique. Dans cette section, on expose les principaux arguments sur lesquels se fonde cette construction.

2.1 "Sens" pour la limite thermodynamique

Numérotons et ordonnons les cellules du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$ en une suite dénombrable $\{\Omega_n\}_{n\in\mathbb{N}}$. Notons qu'on ne fait aucune hypothèse restrictive quant à la géométrie des cellules.
Soient $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$, avec $L \geq 1$, le cube ouvert centré en l'origine des coordonnées et $\partial\Lambda_L$ les bords du cube. Introduisons l'ensemble :

$$\mathfrak{O} := \left\{ \Omega_n,\, n \in \mathbb{N} \ : \ \Omega_n \subset \Lambda_L \ \text{ et } \ \overline{\Omega_n} \cap \partial\Lambda_L = \emptyset \right\}$$

Quitte à choisir L assez grand, $\mathfrak{O}$ est non vide. Considérons alors la décomposition de Λ_L :

$$\Lambda_L = \Lambda_{n_L} \cup \Lambda_{n_L}^c \quad \text{avec} \quad \Lambda_{n_L} := \bigcup_{\Omega_n \in \mathfrak{O}} \Omega_n, \quad n_L := \mathrm{card}(\Omega_n \in \mathfrak{O}) \tag{5.11}$$

De manière équivalente, on peut voir Λ_{n_L} comme l'union de toutes les cellules entières du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$ contenues dans Λ_L excepté celles qui "touchent" les bords $\partial\Lambda_L$.

Montrons maintenant qu'étant donné la décomposition (5.11) :

$$|\Lambda_{n_L}^c| = \mathcal{O}(L^2) \quad \text{lorsque } L \to \infty \tag{5.12}$$

Soit $d := \mathrm{diam}(\Omega)$ le diamètre de la cellule unité du réseau. A une distance des bords $\partial\Lambda_L$ strictement supérieure à d, on se trouve nécessairement à l'intérieur de l'ensemble Λ_{n_L} :

$$\left\{ \mathbf{x} \in \Lambda_L \ : \ \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L) > d \right\} \subset \Lambda_{n_L} \subset \Lambda_L$$

Il s'ensuit alors que :

$$(L-d)^3 < |\Lambda_{n_L}| = n_L|\Omega| < L^3 \tag{5.13}$$

d'où :

$$|\Lambda_{n_L}^c| = |\Lambda_L| - |\Lambda_{n_L}| \leq L^3 - (L-d)^3 = 3dL^2 - 3d^2L + d^3$$

Remarque 5.13. En vertu de (5.13), on a $(n_L|\Omega|)^{\frac{1}{3}} + d > L > (n_L|\Omega|)^{\frac{1}{3}}$. Donc prendre la limite $L \to \infty$ dans Λ_L revient à prendre la limite $n_L \to \infty$ dans Λ_{n_L} ; et inversement.

2.2 Construction des candidats à la limite thermodynamique

L'ingrédient principal intervenant dans la construction des candidats à la limite thermodynamique est le fait que l'Hamiltonien $H_\infty(\omega, V)$ commute avec les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$. Rappelons leur définition et propriétés (voir par ex. [53], [78]) :

Définition 5.14. *Pour $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$, soit $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \frac{1}{2}\mathbf{e}_3 \cdot (\mathbf{y} \wedge \mathbf{x})$ la phase magnétique. Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$, les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$, $\{T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}\}_{\boldsymbol{\upsilon}\in\boldsymbol{\Upsilon}}$, sont définies par :*

$$\forall\, \boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad (T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}\psi)(\mathbf{x}) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}\psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\upsilon}) \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

Plus globalement les translations magnétiques réélles, $\{T_{\mathbf{x}_0,\omega}\}_{\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3}$, sont définies par :

$$\forall\, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3, \quad (T_{\mathbf{x}_0,\omega}\psi)(\mathbf{x}) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)}\psi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

Voici quelques propriétés consécutives à cette définition :
(i). Les translations magnétiques forment un quasi-groupe dans le sens :

$$T_{\mathbf{v}_1,\omega}T_{\mathbf{v}_2,\omega} = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2)}T_{\mathbf{v}_1+\mathbf{v}_2,\omega} \quad \mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2 \in \mathbb{G} = \boldsymbol{\Upsilon} \text{ ou } \mathbb{R}^3$$

(ii) Comme $T_{\mathbf{v},\omega}T_{-\mathbf{v},\omega} = \mathbb{1} = T_{-\mathbf{v},\omega}T_{\mathbf{v},\omega}$ et puisque $T_{\mathbf{v},\omega}$ est un opérateur unitaire :

$$T_{\mathbf{v},\omega}^{-1} = T_{-\mathbf{v},\omega} = T_{\mathbf{v},\omega}^{*} \quad \mathbf{v} \in \mathbb{G} = \boldsymbol{\Upsilon} \text{ ou } \mathbb{R}^3$$

Regardons maintenant ce que la commutation d'un opérateur intégral avec les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$ a comme conséquence sur son noyau.
En utilisant que $\nabla_{\mathbf{x}}\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon}) = \mathbf{a}(\boldsymbol{\upsilon}) = \mathbf{a}(\mathbf{x}) - \mathbf{a}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\upsilon})$, on a l'identité sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})} = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\upsilon})) \quad \omega \in \mathbb{R},\ \boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon} \tag{5.14}$$

assurant, par $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de V, que $H_\infty(\omega,V)$ et $T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}$ commutent : $[H_\infty(\omega,V), T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}] = 0$.
Plus globalement, $T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega}\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega} = \mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))$ pour toute fonction $\mathcal{G} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ borélienne bornée ; $\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))$ est borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ par le calcul fonctionnel (voir [90]).
Supposons que $\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))$ possède un noyau intégral $\mathcal{G}_\infty(\cdot\,,\cdot)$ défini presque partout.
Comme conséquence de $T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega}\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega} = \mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))$, le noyau $\mathcal{G}_\infty(\cdot\,,\cdot)$ vérifie :

$$\forall\,\boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}\mathcal{G}_\infty(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{y}+\boldsymbol{\upsilon})\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y}+\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\upsilon})} = \mathcal{G}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x},\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3 \tag{5.15}$$

En effet, pour tout $\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ et pour presque tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$:

$$\big(T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega}\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}\psi\big)(\mathbf{x}) = \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathcal{G}_\infty(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{y}+\boldsymbol{\upsilon})\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y}+\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\upsilon})}\psi(\mathbf{y})$$

$\mathcal{G}(H_\infty(\omega,V))$ étant borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$, il reste à étendre cette identité pour tout $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$.
Si $\mathcal{G}_\infty(\cdot\,,\cdot)$ est partout défini, on déduit de (5.15) que le noyau diagonal est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique :

$$\forall\,\boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad \mathcal{G}_\infty(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon}) = \mathcal{G}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \tag{5.16}$$

Tous les opérateurs introduits dans la section 1 "résultats principaux" commutent avec les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$. En particulier, considérons le cas de la résolvante.
Pour tout $\xi \in \rho(H_\infty(\omega,V))$, son noyau $R_\infty^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ vérifie en vertu de (5.15) :

$$\forall\,\boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{y}+\boldsymbol{\upsilon};\omega,\xi)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\upsilon})} = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x},\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3 \tag{5.17}$$

Quant aux opérateurs $T_{j,\infty}(\omega,\xi)$ générés par les noyaux $T_{j,\infty}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$, $j \in \{1,2\}$, ils commutent également avec les translations magnétiques. En effet, pour tout $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\begin{aligned}
&\text{p.p. tout } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega}T_{1,\infty}(\omega,\xi)T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}\varphi)(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathbf{a}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon}-\mathbf{y})\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon}))R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{y};\omega,\xi)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\upsilon})}\varphi(\mathbf{y}-\boldsymbol{\upsilon}) \\
&= \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Y}\,\mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{Y})\cdot(i\nabla_{\mathbf{x}}+\omega\mathbf{a}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon}))R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{Y}+\boldsymbol{\upsilon};\omega,\xi)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{Y},\boldsymbol{\upsilon})}\varphi(\mathbf{Y})
\end{aligned}$$

En utilisant (5.17) puis (5.14), le membre de droite s'identifie à $(T_{1,\infty}(\omega,\xi)\varphi)(\mathbf{x})$. En prolongeant par continuité, $T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega}T_{1,\infty}(\omega,\xi)T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega} = T_{1,\infty}(\omega,\xi)$. Même chose pour $T_{2,\infty}(\omega,\xi)$.

Expliquons formellement comment on utilise toutes ces propriétés dans la construction des candidats à la limite thermodynamique. Pour $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, soit $q_L(\beta, \omega, z, \epsilon)$ une grandeur grand-canonique à volume fini caractéristique de la réponse (dia)magnétique du gaz quantique confiné dans le cube $\Lambda_L := (-L/2, L/2)^3$:

$$q_L(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{1}{|\Lambda_L|} \mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda_L)} \big\{ \mathcal{Q}_L(\beta, \omega, z, \epsilon) \big\}$$

où $\mathcal{Q}_L(\beta, \omega, z, \epsilon) \in \mathfrak{I}_1(\Lambda_L)$ possède un noyau $\mathcal{Q}_L(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon) : \Lambda_L \times \Lambda_L \to \mathbb{C}$ continu.
Faisons les hypothèses suivantes :
(1). La suite $\{\mathcal{Q}_L(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon)\}_{L \geq L_0}$ de fonctions converge simplement :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \lim_{L \to \infty} \mathcal{Q}_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) := \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$$

(2). La fonction $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique.
En vertu de (5.16), cette condition est vérifiée si $\mathcal{Q}_\infty(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon)$ génère par exemple un opérateur $\mathcal{Q}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ vérifiant $T_{-\boldsymbol{v},\omega} \mathcal{Q}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) T_{\boldsymbol{v},\omega} = \mathcal{Q}_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$.
(3). La fonction $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est bornée uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$.

Sous ces hypothèses, on peut écrire :

$$q_L(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \big\{ \mathcal{Q}_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \big\} + \\ + \frac{1}{|\Lambda_L|} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$$

Pour le premier terme, supposons que pour L suffisamment grand :

$$\frac{1}{|\Lambda_L|} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \big| \mathcal{Q}_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \big| = \mathcal{O}(L^{-1})$$

Pour le second terme, considérons la décomposition du cube Λ_L comme en (5.11). Comme :

$$\frac{1}{|\Lambda_{n_L}|} = \frac{1}{|\Lambda_L|} \frac{|\Lambda_{n_L}| + |\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|} = \frac{1}{|\Lambda_L|} \left(1 + \frac{|\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|} \right) \tag{5.18}$$

alors :

$$\frac{1}{|\Lambda_L|} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Lambda_{n_L}|} \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) + \\ + \frac{1}{|\Lambda_{n_L}|} \int_{\Lambda_{n_L}^c} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) - \frac{|\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|} \frac{1}{|\Lambda_L|} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \tag{5.19}$$

D'une part, par $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$:

$$\frac{1}{|\Lambda_{n_L}|} \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{n_L}{n_L |\Omega|} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$$

D'autre part, puisque $\mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est borné uniformément en $\mathbf{x}$, les deux dernières intégrales dans (5.19) se majorent par $cste |\Lambda_{n_L}^c| / |\Lambda_{n_L}|$.
Il reste à utiliser (5.12) pour obtenir lorsque L est suffisamment grand :

$$q_L(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathcal{Q}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) + \mathcal{O}(L^{-1})$$

3 Limite thermodynamique : pression grand-canonique

Cette section se décompose en deux parties. Dans une première, on montre que le candidat à la limite thermodynamique pour la pression grand-canonique en (5.2) est bien défini puis on prouve le Théorème 5.1 et son Corollaire 5.2 (qui est une simple conséquence du théorème de Weierstrass). L'ingrédient central dans la preuve du Théorème 5.1 est l'estimation sur la différence des noyaux de la résolvante, voir Proposition 3.4. Cette estimation est cependant un facteur limitant puisqu'elle n'est plus valide pour des potentiels V singuliers. Dans une second partie, on développe une autre stratégie pour étendre les résultats du Théorème 5.1, et par suite du Corollaire 5.2, pour des potentiels singuliers (typiquement dans la classe de Kato locale). Cette stratégie utilise essentiellement les propriétés de la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(\omega, V)$.

3.1 Preuve du Théorème 5.1 et du Corollaire 5.2

On commence par démontrer ce premier résultat :

Proposition 5.15. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z e^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
(i) Sous l'hypothèse $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0 > 0$, introduisons :

$$\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi) \tag{5.20}$$

Alors $\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.
Son noyau $\mathcal{I}_{\infty,0}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est continu et sa partie diagonale vérifie :

$$\begin{aligned} \forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) &= \frac{i}{2\pi} \bigg(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi) \bigg) \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\ &= -\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R^{(2)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega, \xi) \end{aligned} \tag{5.21}$$

où $R^{(2)}_\infty(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \xi) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est le noyau intégral de $R^2_\infty(\omega, \xi)$ et $F_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ est une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ exponentiellement décroissante sur le contour Γ_K (cf. Lemme 4.16).
(ii) Si en plus V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique, alors $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique :

$$\forall\, \boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad \mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\upsilon}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\upsilon}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

Preuve Proposition 5.15.
(i). La preuve reprend les mêmes arguments que ceux des sections 2 et 4 du chapitre 4.
A partir de l'estimation (3.2), le critère de Schur-Holmgren donne l'existence d'un polynôme $p(\cdot\,)$ tel que pour tout $\xi \in \Gamma_K$, $\|R_\infty(\omega, \xi)\| \leq p(|\xi|)$. En vertu de la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur Γ_K, il existe une constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\|\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta, \omega, z, \epsilon)\| \leq \frac{1}{2\pi} \sup_{z \in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|R_\infty(\omega, \xi)\| \leq c < +\infty$$

Encore à partir de l'estimation (3.2), il existe un autre polynôme $p(\cdot\,)$ tel que :

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \|R_\infty(\omega, \xi)\|_{2,\infty} = \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \bigg(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi)|^2 \bigg)^{\frac{1}{2}} \leq p(|\xi|) \tag{5.22}$$

En vertu de (2.16), il existe une autre constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\|\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)\|_{2,\infty} \leq \frac{1}{2\pi}\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\|R_\infty(\omega,\xi)\|_{2,\infty} \leq c < +\infty$$

Par le théorème de Dunford-Pettis (voir [101]), $\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est un opérateur intégral :

$$\forall\,\phi \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \ \big(\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)\phi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\,\mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,z,\epsilon)\phi(\mathbf{y})\ \text{ p.p. tout } \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3$$

Il reste maintenant à identifier ce noyau et à étudier ses propriétés de régularité.
D'une part, en utilisant que $R_\infty(\omega,\xi)$ est un opérateur intégral, pour tout $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\big(\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3 \tag{5.23}$$

D'autre part, en effectuant une intégration par parties (par rapport à la variable ξ) dans (5.20), puis en utilisant que $R_\infty^2(\omega,\xi)$ est un opérateur intégral, pour tout $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\big(\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) = -\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,R_\infty^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\varphi(\mathbf{y}) \quad \text{p.p. tout } \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3 \tag{5.24}$$

où $F_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ est une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ choisie exponentiellement décroissante sur Γ_K. Justifié par l'estimation $\operatorname{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,|R_\infty^{(j)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)| \leq p(|\xi|)$, $j\in\{1,2\}$; le théorème de Tonelli assure l'intervertion des intégrales dans (5.23) et (5.24). $\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ étant borné, ces identités se prolongent par continuité $\forall\,\varphi\in L^2(\mathbb{R}^3)$. On peut identifier :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,z,\epsilon) &= \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) \quad \text{p.p. tout } (\mathbf{x},\mathbf{y})\in\mathbb{R}^6\\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)R_\infty^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\end{aligned}$$

Comme $R_\infty^{(2)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ est continu sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$ et uniformément borné par un polynôme en $|\xi|$ (voir Corollaire 3.2), le théorème de continuité sous le signe intégrale assure que $\mathcal{I}_{\infty,0}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ est continu sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$. Ainsi l'intégration par rapport à ξ de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\cdot\,)$ fait disparaître la singularité sur la diagonale de $R_\infty^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$.
(ii). Soient $\{T_{\boldsymbol{v},\omega}\}_{\boldsymbol{v}\in\boldsymbol{\Upsilon}}$ les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$, voir Définition 5.14.
Puisque $[T_{\boldsymbol{v},\omega}, R_\infty(\omega,\xi)] = 0$, il s'ensuit que $T_{-\boldsymbol{v},\omega}\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)T_{\boldsymbol{v},\omega} = \mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$.
$\mathcal{I}_{\infty,0}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ étant continu, sa diagonale est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique (cf. paragraphe 2.2).

■

Remarque 5.16. En vertu de la Proposition 5.15, le candidat à la limite thermodynamique pour la pression grand-canonique (5.2) est bien défini :

$$P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) \quad \beta>0,\ \omega\in\mathbb{R},\ z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

On peut montrer que ce candidat peut encore s'écrire :

$$P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)\} \quad \beta>0,\ \omega\in\mathbb{R},\ z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

Il suffit pour cela de montrer que $\chi_\Omega \mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon) \in \mathfrak{I}_1(L^2(\mathbb{R}^3))$. Pour le voir, choisissons $\xi_0 < E_0(\omega)$ avec $|\xi_0|$ assez grand. Partant de (5.20) puis en utilisant la première équation résolvante itérée deux fois suivi du théorème intégral de Cauchy :

$$\chi_\Omega \mathcal{I}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \chi_\Omega R^2_\infty(\omega,\xi_0)\left(\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, (\xi-\xi_0)^2 \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R_\infty(\omega,\xi)\right)$$

D'une part, l'intégrale entre parenthèses est absolument convergente dans $\mathfrak{B}(L^2(\mathbb{R}^3))$. D'autre part, via (3.3) :

$$\|\chi_\Omega R^2_\infty(\omega,\xi_0)\|_{\mathfrak{I}_1} \leq \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \chi_\Omega(\mathbf{x}) |R^{(2)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,\xi_0)| \leq c_{\xi_0}|\Omega| < +\infty$$

Il reste à utiliser que $\mathfrak{I}_1(L^2(\mathbb{R}^3))$ est un idéal bilatère pour conclure.

Preuve Théorème 5.1.
La limite thermodynamique est prise dans le sens indiqué dans le paragraphe 2.1. Considérons la décomposition du cube Λ_L : $\Lambda_L = \Lambda_{n_L} \cup \Lambda^c_{n_L}$, voir (5.11). A partir de (5.2) :

$$\begin{aligned} P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) &= \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{\beta|\Lambda_{n_L}|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \end{aligned}$$

où on a utilisé la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$, voir (ii) Proposition 5.15. Puis en utilisant (5.18), il vient :

$$\begin{aligned} &P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) - P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) = \\ &\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|}\frac{i}{2\pi}\Bigg\{\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) - R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\}\right)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} + \\ &\qquad + \int_{\Lambda^c_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} + \\ &\qquad\qquad - \frac{|\Lambda^c_{n_L}|}{|\Lambda_{n_L}|}\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\right)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}\Bigg\} \end{aligned}$$

que l'on peut encore écrire :

$$\begin{aligned} &P_L(\beta,\omega,z,\epsilon) - P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) = \\ &\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\Bigg\{\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\,\{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) - R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} + \\ &\qquad - \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda^c_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, R^{(2)}_L(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,\xi) + \\ &\qquad\qquad + \frac{|\Lambda^c_{n_L}|}{|\Lambda_{n_L}|}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, R^{(2)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,\xi)\Bigg\} \end{aligned} \tag{5.25}$$

car $\Lambda_{n_L} \ni \mathbf{x} \mapsto \{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) - R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\}|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ est continue (voir (i) Proposition 3.4, compte-tenu de la définition de Λ_{n_L}) ainsi que $\Lambda_L \ni \mathbf{x} \mapsto R^{(2)}_L(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,\xi)$, $L \in [1,\infty]$.

Il ne reste plus qu'à majorer le membre de droite de (5.25) uniformément en $z \in K$. Puisque pour $L \in [1, \infty]$, $R_L^{(2)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ est uniformément borné par un polynôme $p(|\xi|)$ $\forall\, \xi \in \Gamma_K$, alors en vertu de (4.66), il existe une constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\sup_{z\in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \int_{\Lambda_{n_L}^{(c)}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega, \xi)| \leq c|\Lambda_{n_L}^{(c)}|$$

Puis compte-tenu de (5.12), il s'ensuit que pour L suffisamment grand :

$$\sup_{z\in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \int_{\Lambda_{n_L}^c} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |R_L^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega, \xi)| = \mathcal{O}(L^2) \tag{5.26}$$

$$\frac{|\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|} \sup_{z\in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |R_\infty^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega, \xi)| = \mathcal{O}(L^2) \tag{5.27}$$

Ensuite en utilisant l'estimation (ii) Proposition 3.4 (en substituant $\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\cdot\,)$ à $\chi_{\Lambda_\kappa}(\cdot\,)$), il existe un réél $\delta > 0$ assez petit et un autre polynôme $p(\cdot\,)$ tels que :

$$\begin{aligned}
&\sup_{z\in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \left|\{R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi)\}\right|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}\Big| \\
&\qquad \leq (1 + |\omega|)^3 \sup_{z\in K} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, p(|\xi|) |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L)} \\
&\qquad \leq c(\beta, K)(1 + |\omega|)^3 L^2
\end{aligned} \tag{5.28}$$

où on a utilisé (2.16) ainsi que l'estimation, valable pour tout réél $\gamma > 0$:

$$\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathrm{e}^{-\gamma \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L)} \leq \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathrm{e}^{-\gamma \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda_L)} \leq L^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_j\, \mathrm{e}^{-\gamma|x_j - L/2|} = \gamma^{-1} L^2 \tag{5.29}$$

Regroupant (5.26), (5.27) et (5.28), le théorème est prouvé.

■

On rappelle l'énoncé du Théorème de Weierstrass (voir par ex. [45]) :

<u>Théorème</u> 5.17. *<u>Théorème de Weierstrass</u>*
Soit $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{C}$ un ouvert non-vide du plan complexe. Soit $\{f_n(\cdot\,)\}_{n\geq 1} : \mathcal{U} \to \mathbb{C}$ une suite de fonctions analytiques convergeant uniformément sur tout compact $K \subset \mathcal{U}$ vers f.
Alors f est analytique sur $\mathcal{U}$. De plus, pour tout entier $m \in \mathbb{N}^*$, la suite de fonctions $\{(d_z^m f_n)(\cdot\,)\}_{n\geq 1}$ converge uniformément sur tout compact vers la fonction $(d_z^m f)(\cdot\,)$:

$$\forall\, K \subset \mathcal{U}, \quad \lim_{n\to\infty} \sup_{z\in K} \left| \frac{d^m f_n}{dz^m}(z) - \frac{d^m f}{dz^m}(z) \right| = 0$$

Preuve Corollaire 5.2.
Il suffit d'appliquer le Théorème de Weierstrass à la suite de fonctions $\{P_L(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)\}_{L\geq 1}$ analytiques sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ convergeant uniformément sur tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ vers $P_\infty(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ (cf. Théorème 5.1). En particulier :

$$\forall\, K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega)), \quad \lim_{L\to\infty} \sup_{z\in K} |\beta z(\partial_z P_L)(\beta, \omega, z, \epsilon) - \beta z(\partial_z P_\infty)(\beta, \omega, z, \epsilon)| = 0$$

Par conséquent, $\beta z(\partial_z P_\infty)(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est la limite thermodynamique de $\rho_L(\beta, \omega, z, \epsilon)$.

■

3.2 Extensions

Il n'est pas possible d'étendre directement la preuve ci-dessus pour des potentiels V singuliers car l'estimation (3.5) n'est valable que pour $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, $\epsilon_0 > 0$.

On va alors utiliser une autre démonstration reposant sur les propriétés de la densité d'états intégrée (IDS) de l'opérateur $H_\infty(\omega, V)$ dont on rappelle sa définition.

Définition 5.18. *Soit $\omega \in \mathbb{R}$. Pour $E \in \mathbb{R}$, soit $N_L(E, \omega)$ le nombre de valeurs propres de l'opérateur $H_L(\omega, V)$, $1 \leq L < \infty$, plus petites que E comptées avec leur multiplicité. On définit la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(\omega, V)$ comme la limite, si elle existe,*

$$n_\infty(E) = n_\infty(E, \omega) := \lim_{L\to\infty} \frac{N_L(E, \omega)}{|\Lambda_L|}$$

On introduit la formule de Pastur-Shubin (voir [84]) sous nos hypothèses (voir [58]) :

Proposition 5.19. *Sous l'hypothèse $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$, la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(\omega, V)$ existe, et pour presque tout $E \in \mathbb{R}$:*

$$n_\infty(E) = \frac{1}{|\Omega|} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_\Omega \mathrm{P}(E)\}$$

où $\mathrm{P}(E) = \mathrm{P}_{(-\infty,E]}$ est le projecteur spectral associé à $H_\infty(\omega, V)$ sur l'intervalle $(-\infty, E]$.

Preuve Théorème 5.1 sous l'hypothèse $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$.
En utilisant que la pression grand-canonique à volume fini peut aussi s'écrire (voir [20]) :

$$P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) = -\frac{\epsilon}{\beta} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}E \, \frac{\partial \mathfrak{f}_\epsilon}{\partial E}(\beta, z; E) \frac{N_L(E, \omega)}{|\Lambda_L|}$$

et que sous l'hypothèse $V \in \mathcal{K}_\pm(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$, la densité d'états intégrée de $H_\infty(\omega, V)$ existe, on obtient uniformément sur les compacts en z :

$$P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \lim_{L\to\infty} P_L(\beta, \omega, z, \epsilon) = -\frac{\epsilon}{\beta} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}E \, \frac{\partial \mathfrak{f}_\epsilon}{\partial E}(\beta, z; E) n_\infty(E)$$

Reste à réécrire cette expression pour obtenir (5.8). A partir de la Proposition 5.19 et compte-tenu du fait que $\{\chi_\Omega \mathrm{P}(E),\ E \in \mathbb{R}\}$ est une famille d'opérateurs à trace :

$$\begin{aligned} P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) &= -\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}E \, \frac{\partial \mathfrak{f}_\epsilon}{\partial E}(\beta, z; E) \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_\Omega \mathrm{P}(E)\} \\ &= \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \left\{ \chi_\Omega \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}\mathrm{P}(E) \, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; E) \right\} \end{aligned}$$

où la seconde identité provient d'une intégration par parties par rapport à la variable E. Il reste à utiliser le théorème spectral (voir par ex. [90]) (on ne donne pas plus de détails) :

$$P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \big\{ \chi_\Omega \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; H_\infty(\omega, V)) \big\}$$

suivi d'une intégrale issue du calcul fonctionnel de Dunford-Schwartz (voir [44]).

■

4 Limite thermodynamique : aimantation grand-canonique

On se propose de prouver le Théorème 5.3 dans le cas particulier de l'aimantation grand-canonique pour se familiariser avec la méthode. Les ingrédients principaux de cette preuve sont les estimations en (ii) Propositions 3.4 et 3.5 conjointement.

On commence par montrer que le candidat à la limite thermodynamique en (5.6) (cas $n = 1$) est bien défini :

Proposition 5.20. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
(i). *Sous l'hypothèse $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0 > 0$, introduisons :*

$$\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi)$$

avec $T_{1,\infty}(\omega, \xi)$ l'opérateur généré par le noyau $T_{1,\infty}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \xi)$ défini en (5.4).
Alors $\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.
Son noyau intégral $\mathcal{I}_{\infty,1}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est continu et est défini par :

$$\mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, \xi) T_{1,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, \xi) \tag{5.30}$$

(ii). *Si en plus V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique, alors $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique :*

$$\forall\, \boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\upsilon}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\upsilon}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

Preuve Proposition 5.20.
(i). La preuve reprend les mêmes arguments que ceux des sections 2 et 4 du chapitre 4. Compte-tenu de l'expression du noyau (5.4), en utilisant l'estimation $|\mathbf{a}(\mathbf{x} - \mathbf{y})| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ ainsi que l'estimation (3.4), il existe un réél $\delta > 0$ assez petit et un polynôme $p(\cdot\,)$ tels que :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |T_{1,\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \xi)| \leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \tag{5.31}$$

Le critère de Schur-Holmgren donne alors l'existence d'un autre polynôme $p(\cdot\,)$ tel que pour tout $\xi \in \Gamma_K$, $\|T_{1,\infty}(\omega, \xi)\| \leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3$. Et en vertu de la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur le contour Γ_K, il existe une constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\|\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon)\| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|R_\infty(\omega, \xi)\| \|T_{1,\infty}(\omega, \xi)\| \leq c(1 + |\omega|)^3$$

Aussi de par l'estimation (5.22), il existe une autre constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\|\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon)\|_{2,\infty} \leq \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)| \|R_\infty(\omega, \xi)\|_{2,\infty} \|T_{1,\infty}(\omega, \xi)\|_{2,2} \leq c(1 + |\omega|)^3$$

D'après le théorème de Dunford-Pettis, $\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral :

$$\forall\, \phi \in L^2(\mathbb{R}^3), \ \big(\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta, \omega, z, \epsilon)\phi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, z, \epsilon)\phi(\mathbf{y}) \ \text{ p.p. tout } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

Il reste maintenant à identifier ce noyau et à étudier ses propriétés de régularité.
Pour cela, on utilise que l'opérateur $R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)$ possède un noyau défini par :

$$\big(R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{y}) := \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,\xi)$$

Les noyaux $R_\infty^{(1)}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ et $T_{1,\infty}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ vérifiant les hypothèses du Lemme 3.21 ; l'application $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \big(R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{y})$ est par conséquent continue sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$.
Comme $R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)$ est un opérateur intégral, on peut alors écrire $\forall\,\varphi\in\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\big(\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\,\big(R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{y})\varphi(\mathbf{y}) \tag{5.32}$$

Justifié par l'estimation (voir Lemme 3.25 à partir des estimations (3.2) et (5.31)) :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad \sup_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{y};\omega,\xi)| \le p(|\xi|)(1+|\omega|)^3 \tag{5.33}$$

le théorème de Tonelli assure ainsi l'intervertion des intégrales dans (5.32) :

$$\big(\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)\varphi\big)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{y}\bigg(\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\big(R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\big)(\mathbf{x},\mathbf{y})\bigg)\varphi(\mathbf{y})$$

et cette identité peut être prolongée par continuité pour tout $\varphi\in L^2(\mathbb{R}^3)$ puisque l'opérateur $\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. Par identification du noyau, on obtient (5.30).
Compte-tenu de l'estimation (5.33) suivi de (2.16), le théorème de continuité sous le signe intégrale assure que le noyau $\mathcal{I}_{\infty,1}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ en (5.30) est continu sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$.
(ii). Soient $\{T_{\boldsymbol{v},\omega}\}_{\boldsymbol{v}\in\boldsymbol{\Upsilon}}$ les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$. D'après (i), le noyau $\mathcal{I}_{\infty,1}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ est continu. Pour assurer la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de sa partie diagonale, il suffit donc que $\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon) = T_{-\boldsymbol{v},\omega}\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)T_{\boldsymbol{v},\omega}$. Ceci est une conséquence de $[R_\infty(\omega,\xi),T_{\boldsymbol{v},\omega}]=0$ et $[T_{1,\infty}(\omega,\xi),T_{\boldsymbol{v},\omega}]=0$, voir paragraphe 2.2.

■

Remarque 5.21. En vertu de la Proposition 5.20, le candidat à la limite thermodynamique pour l'aimantation grand-canonique (5.6) (avec $n=1$) est bien défini :

$$\mathcal{X}_\infty^1(\beta,\omega,z,\epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)\quad \beta>0,\ \omega\in\mathbb{R},\ z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

Ce candidat peut également s'écrire :

$$\mathcal{X}_\infty^1(\beta,\omega,z,\epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)\}\quad \beta>0,\ \omega\in\mathbb{R},\ z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

Pour le voir, il suffit de montrer que $\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)\in\mathfrak{I}_1(L^2(\mathbb{R}^3))$ à partir de :

$$\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega$$

D'abord, chacun des opérateurs $\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)$ et $T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega$ est de Hilbert-Schmidt sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ dont chacune des normes $\|\cdot\|_{\mathfrak{I}_2}$ est bornée par un polynôme en $|\xi|$:

$$\|\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \chi_\Omega(\mathbf{x}) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq p(|\xi|)|\Omega|^{\frac{1}{2}}$$

$$\|T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega\|_{\mathfrak{I}_2} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{x}\, \chi_\Omega(\mathbf{x}) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |T_{1,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq p'(|\xi|)(1+|\omega|)^3|\Omega|^{\frac{1}{2}}$$

Puis en utilisant (2.16), il existe une constante $c = c(\beta, K, |\omega|) > 0$ telle que :

$$\|\chi_\Omega \mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)\|_{\mathfrak{I}_1} \leq \frac{1}{2\pi}\int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)| \|\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)\|_{\mathfrak{I}_2} \|T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega\|_{\mathfrak{I}_2} \leq c$$

Remarque 5.22. Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$. La Proposition 5.27 permettra d'établir que le noyau diagonal de l'opérateur $\mathcal{I}_{\infty,1}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ vérifie :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) = \lim_{L\to\infty} (\partial_\omega \mathcal{I}_L)(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$$

où $(\partial_\omega \mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ est le noyau de $(\partial_\omega \mathcal{I}_L)(\beta,\omega,z,\epsilon) := \partial_\omega \ln(\mathbb{1} + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega)})$, avec $1 \leq L < \infty$, continu sur $\Lambda_L \times \Lambda_L$, voir Proposition 4.15.

On a besoin maintenant d'un dernier résultat (sa preuve se trouve en annexe) :

Lemme 5.23. *Il existe une constante $c > 0$ telle que :*

$$\forall\, \gamma > 0, \quad \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^k} \leq c\gamma^{-(2+k)}L^2 \quad k \in \{1,2\} \tag{5.34}$$

Preuve Théorème 5.3 (cas $n = 1$).
La limite thermodynamique est prise dans le sens indiqué dans le paragraphe 2.1.
Pour cela, on considère la décomposition du cube Λ_L comme $\Lambda_L = \Lambda_{n_L} \cup \Lambda_{n_L}^c$, voir (5.11).
Dans toute cette preuve, on va utiliser (intensivement) les deux estimations ci-dessous.
A partir des estimations (3.2) et (3.4) d'une part, et à partir de (3.5) et (3.6) d'autre part, il existe un réél $\delta > 0$ suffisamment petit et un polynôme $p(\cdot\,)$ tels que :

$$\begin{aligned}
&\forall\, L \in [1,\infty],\ \forall\, (\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K,\\
&\max\left\{|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi), |T_{j,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|\right\} \leq p(|\xi|)(1+|\omega|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad j \in \{1,2\}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

$$\begin{aligned}
&\forall\, L \in [1,\infty),\ \forall\, (\mathbf{x},\mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K,\\
&\quad \max\left\{|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|, |T_{j,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi) - T_{j,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|\right\}\\
&\leq p(|\xi|)(1+|\omega|)^6 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\left\{\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{x}) + \chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{y}) + \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\{\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)+\mathrm{dist}(\mathbf{y},\partial\Lambda_L)\}}\right\}
\end{aligned} \tag{5.36}$$

où on a utilisé que $|\mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y})| \leq |\mathbf{x}-\mathbf{y}|$ pour $T_{j,L}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ suivi de (4.25) pour $j=2$.
A partir de l'expression (5.6) dans le cas $n=1$ puis en utilisant la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,1}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$ (voir (ii) Proposition 5.20) :

$$\begin{aligned}\mathcal{X}^1_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) &= \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\\ &= \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_{n_L}|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\end{aligned}$$

Puis en utilisant (5.18), il vient :

$$\begin{aligned}&\left(\frac{c}{q}\right)\big(\mathcal{X}^1_L(\beta,\omega,z,\epsilon)-\mathcal{X}^1_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)\big) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot\\ &\cdot\Big\{\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\Big(\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\Big)+\\ &\qquad+\int_{\Lambda^c_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)+\\ &\qquad\qquad-\frac{|\Lambda^c_{n_L}|}{|\Lambda_{n_L}|}\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\Big\}\end{aligned}$$

que l'on peut encore écrire :

$$\begin{aligned}&\left(\frac{c}{q}\right)\big(\mathcal{X}^1_L(\beta,\omega,z,\epsilon)-\mathcal{X}^1_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)\big) = \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot\\ &\cdot\Big\{\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\big\{\big[R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)\big]T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)+\\ &\qquad+R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)\big[T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\big]\big\}+\\ &\qquad+\int_{\Lambda^c_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)+\\ &\qquad-\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)+\\ &\qquad\qquad-\frac{|\Lambda^c_{n_L}|}{|\Lambda_{n_L}|}\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)\Big\}\end{aligned}\tag{5.37}$$

où on a utilisé notamment l'identité :

$$\begin{aligned}\forall\,\mathbf{x}\neq\mathbf{z},\quad R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi) =\\ [R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)]T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)+\\ +R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)[T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)]\end{aligned}$$

Il reste à majorer le membre de droite de (5.37) uniformément en $z\in K$ et uniformément en $\omega\in[\omega_1,\omega_2]\subset\mathbb{R}$, avec $-\infty<\omega_1<\omega_2<+\infty$.
A partir de l'estimation (5.33) valable pour $L\in[1,\infty]$ et utilisant la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ sur Γ_K, il existe une constante $c=c(\beta,K)>0$ telle que :

$$\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\Lambda^{(c)}_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|\leq c(1+|\omega|)^6|\Lambda^{(c)}_{n_L}|$$

d'où l'on déduit, compte-tenu de (5.12), que pour L suffisamment grand :

$$\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\Lambda_{n_L}^c}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|=\mathcal{O}(L^2) \tag{5.38}$$

$$\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\frac{|\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|}\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|=\mathcal{O}(L^2) \tag{5.39}$$

D'autre part, par l'intermédiaire du Lemme 5.23, il existe un autre polynôme $p(\cdot)$ tel que :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|\le p(|\xi|)(1+|\omega|)^6L^2$$

d'où l'on déduit que pour L suffisamment grand :

$$\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|=\mathcal{O}(L^2) \tag{5.40}$$

Il ne reste plus qu'à prouver l'existence d'une constante $c=c(\beta,K,[\omega_1,\omega_2])>0$ telle que :

$$\begin{aligned}\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}\int_{\Gamma_K}|\mathrm{d}\xi|\,|\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)|\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\big\{&|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)-R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)|\cdot\\ &\cdot|T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|+|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)||T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|\big\}\le cL^2\end{aligned} \tag{5.41}$$

A partir de (5.35) et (5.36), il existe $\delta>0$ assez petit et un autre polynôme $p(\cdot)$ tels que :

$$\begin{aligned}\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\big\{&|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)-R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)||T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|+\\ &+|R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,\xi)||T_{1,L}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)-T_{1,\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};\omega,\xi)|\big\}\\ \le p(|\xi|)(1+|\omega|)^9\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,&\Big\{2\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{x})+2\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{z})+2\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)}\Big\}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}\end{aligned}$$

D'abord, le premier terme du membre de droite disparaît puisque $\forall\,\mathbf{x}\in\Lambda_{n_L}$, $\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{x})=0$. Puis l'estimation $\forall\,\xi\in\Gamma_K$, $\operatorname{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|^2}\le p(|\xi|)$ pour un autre polynôme va jouer un double rôle. Elle permet non seulement l'application du théorème de Tonelli :

$$\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{z})\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|^2}=\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{z})\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|^2}$$

mais aussi, elle fournit l'estimation :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\chi_{\Lambda_{n_L}^c}(\mathbf{z})\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|^2}\le p(|\xi|)|\Lambda_{n_L}^c|$$

Enfin en utilisant l'estimation (5.29), il existe un autre polynôme $p(\cdot)$ tel que :

$$\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad\int_{\Lambda_{n_L}}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|^2}\le p(|\xi|)L^2$$

En regroupant les deux estimations ci-dessus puis en utilisant (2.16), on obtient (5.41).
A partir de (5.37) avec (5.38), (5.39), (5.40), (5.41), le Théorème 5.3 est prouvé pour $n=1$.

5 Limite thermodynamique : susceptibilités grand-canonique

5.1 Préliminaires

Avant de montrer que les candidats à la limite thermodynamique en (5.6) pour les susceptibilités généralisées grand-canonique sont bien définis, arrêtons-nous quelques instants sur le cas de la susceptibilité magnétique grand-canonique :

Proposition 5.24. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
(i). Sous l'hypothèse $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0 > 0$, introduisons :

$$\mathcal{I}_{\infty,2}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi) \{T_{1,\infty}(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi) - T_{2,\infty}(\omega, \xi)\}$$

avec $T_{1,\infty}(\omega, \xi)$ et $T_{2,\infty}(\omega, \xi)$ les opérateurs générés par leur noyau respectif (5.4) *et* (5.5). *Alors $\mathcal{I}_{\infty,2}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.*
Son noyau intégral $\mathcal{I}_{\infty,2}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est continu et est défini par :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\infty,2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \Big\{ &- \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, \xi) T_{2,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, \xi) + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_2\, R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega, \xi) T_{1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega, \xi) T_{1,\infty}(\mathbf{z}_2, \mathbf{y}; \omega, \xi) \Big\} \quad (5.42)\end{aligned}$$

(ii). Si en plus V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique, alors $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique.

Preuve Proposition 5.24.
(i). En utilisant les mêmes arguments que ceux utilisés dans la preuve de la Proposition 5.20, on montre que $\mathcal{I}_{\infty,2}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.
Par identification (voir méthode preuve Proposition 5.20), son noyau est défini par :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\infty,2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \Big\{ &- \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \omega, \xi) T_{2,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, \xi) + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \big(R_\infty(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi)\big)(\mathbf{x}, \mathbf{z}) T_{1,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{y}; \omega, \xi) \Big\}\end{aligned}$$

Compte-tenu des estimations (5.33) et (5.35), les noyaux $\big(R_\infty(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi)\big)(\cdot\,, \cdot\,)$ et $T_{1,\infty}(\omega, \xi)(\cdot\,, \cdot\,)$ vérifient les hypothèses du Lemme 3.21. Idem pour les noyaux $R^{(1)}_\infty(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \xi)$ et $T_{2,\infty}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \xi)$. Par conséquent, $\mathcal{I}_{\infty,2}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est continu sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$.
(ii). Soient $\{T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega}\}_{\boldsymbol{\upsilon}}$ les translations magnétiques du réseau $\boldsymbol{\Upsilon}$. Le noyau $\mathcal{I}_{\infty,2}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon)$ étant continu d'après *(i)*, la $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de sa partie diagonale est une conséquence de $T_{-\boldsymbol{\upsilon},\omega} \mathcal{I}_{\infty,2}(\beta, \omega, z, \epsilon) T_{\boldsymbol{\upsilon},\omega} = \mathcal{I}_{\infty,2}(\beta, \omega, z, \epsilon)$, voir paragraphe 2.2.

■

Remarque 5.25. En vertu de la Proposition 5.24, le candidat à la limite thermodynamique pour la susceptibilité magnétique grand-canonique (5.6) (avec $n = 2$) est bien défini :

$$\mathcal{X}^2_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) = 2\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathcal{I}_{\infty,2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R},\ z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

Ce candidat peut encore s'écrire :

$$\mathcal{X}^2_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon) = 2\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_\Omega \mathcal{I}_{\infty,2}(\beta,\omega,z,\epsilon)\} \quad \beta>0,\ \omega\in\mathbb{R},\ z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$$

Il suffit pour cela de montrer que $\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,2}(\beta,\omega,z,\epsilon)\in\mathfrak{I}_1(L^2(\mathbb{R}^3))$ à partir de :

$$\chi_\Omega\mathcal{I}_{\infty,2}(\beta,\omega,z,\epsilon) = -\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)T_{2,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega + \\ + \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega$$

D'après la Remarque 5.21, les opérateurs $\chi_\Omega R_\infty(\omega,\xi)$ et $T_{1,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega$ sont de Hilbert-Schmidt et leur norme $\|\cdot\|_{\mathfrak{I}_2}$ est bornée par un polynôme en $|\xi|$. Même chose pour $T_{2,\infty}(\omega,\xi)\chi_\Omega$. On conclut en utilisant la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot)$ sur Γ_K et le fait qu'un produit de deux opérateurs de Hilbert-Schmidt est un opérateur à trace.

Le résultat ci-dessous garantit que les candidats à la limite thermodynamique pour les susceptibilités généralisées (5.6) sont bien définis :

Proposition 5.26. *Soient $\beta>0$ et $\omega\in\mathbb{R}$. Soient $z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K\subset\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z\in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi\mapsto\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi):=\ln(1+\epsilon z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
(i). Sous l'hypothèse $V\in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ avec $\epsilon_0>0$, introduisons pour tout $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3$:

$$\forall\, n\in\mathbb{N}^*,\quad \mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) := n!\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^k\cdot \\ \cdot\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi^k_j(i_1,\dots,i_j)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!}R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\xi)\cdot \\ \cdot T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\xi)\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\xi)T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\xi) \quad (5.43)$$

Alors il existe une constante $c_n=c(\beta,K,|\omega|,n)>0$ telle que :

$$\forall\,\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3,\quad |\mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)|\le c_n \quad (5.44)$$

(ii). Si en plus V est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique, alors $\mathbf{x}\mapsto\mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$ est $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique :

$$\forall\,\boldsymbol{\upsilon}\in\boldsymbol{\Upsilon},\quad \mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon};\beta,\omega,z,\epsilon)=\mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)\quad \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3$$

Preuve Proposition 5.26.
Avec la convention $0^0=1$, pour tout entier $j\ge1$, $m\in\mathbb{N}$ et $L\in[1,\infty]$; posons :

$$\mathcal{K}^{j,m}_L=\mathcal{K}^{j,m}_L(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j;\omega,\xi) := \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\big)^m}{m!}R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\xi)\cdot \\ \cdot T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\xi)\cdots T_{i_{j-1},L}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\xi)T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\xi) \quad (5.45)$$

On commence par majorer la quantité $|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}|$. Pour cela on utilise l'estimation (5.35). Il existe $\delta > 0$ suffisamment petit et un polynôme $p_{j+1}(\cdot)$ tels que pour tout $\xi \in \Gamma_K$:

$$|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}| \leq p_{j+1}(|\xi|)(1+|\omega|)^{3j+3} \frac{|i\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|} \tag{5.46}$$

La notation $p_{j+1}(\cdot)$ signifie ici que le degré du polynôme est de la forme $\kappa(j+1)$, $\kappa > 0$. A partir de la définition (4.11), utilisons maintenant l'estimation :

$$|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{z}_0,\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)| \leq \sum_{l=1}^{j-1}\sum_{l'=1}^{l} |\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}||\mathbf{z}_l-\mathbf{z}_{l+1}| \quad \text{avec } \mathbf{z}_0 := \mathbf{x}$$

Ainsi, pour $1 \leq l \leq j-1$, $1 \leq l' \leq l$ et $\mathbf{z}_0 := \mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j \in \mathbb{R}^{3(j+1)}$:

$$\begin{aligned}
&\frac{|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{z}_0,\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} \\
&\leq \frac{1}{(n-k)!}\Bigg(\sum_{l=1}^{j-1}\sum_{l'=1}^{l} |\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}||\mathbf{z}_l-\mathbf{z}_{l+1}| \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{(n-k)(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|^{\frac{1}{n-k}}} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{(n-k)(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|^{\frac{1}{n-k}}}\Bigg)^{n-k} \\
&\leq c^{2(n-k)}(1+|\xi|)^{2(n-k)} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}
\end{aligned} \tag{5.47}$$

avec $c > 0$, et où on a utilisé que pour tout $\mu, \nu > 0$ et $\forall\, t \in (0,+\infty)$, $t^\nu \mathrm{e}^{-\mu t} \leq \big(\frac{2\nu}{\mu \mathrm{e}}\big)^\nu \mathrm{e}^{-\frac{\mu}{2}t}$. Le reste de la preuve est basé sur le fait qu'il existe un autre polynôme $p_j(\cdot)$ tel que :

$$\sup_{\mathbf{z}_0\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} \leq p_j(|\xi|) \quad \xi \in \Gamma_K \tag{5.48}$$

Ainsi en réunissant (5.47) et (5.48), il existe un autre polynôme $p_n(\cdot)$ et une autre constante $c > 1$ tels que uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned}
\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad &\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, |\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,\xi)| \\
&\leq c^n\Bigg(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!}\Bigg)(1+|\omega|)^{3n+3} p_n(|\xi|)
\end{aligned}$$

Il reste à utiliser la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ sur Γ_K pour obtenir (5.44).
(ii). Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. D'une part en utilisant que $\phi(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{e}_3}{2} \cdot (\mathbf{v} \wedge \mathbf{u})$, on a pour $j \in \mathbb{N}^*$:

$$\begin{aligned}
\forall\, \boldsymbol{\upsilon} \in \boldsymbol{\Upsilon}, \quad &\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j) \\
&= \phi(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_1) + \phi(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2) + \cdots + \phi(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j) + \phi(\mathbf{z}_j,\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon}) \\
&= \phi(\mathbf{x},\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon}) + \phi(\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_2-\boldsymbol{\upsilon}) + \cdots + \phi(\mathbf{z}_{j-1}-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon}) + \phi(\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon},\ldots,\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon})
\end{aligned}$$

D'autre part, en utilisant (5.17) puis (5.15) appliqué au noyau $T_{i_l,\infty}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$, $i_l \in \{1,2\}$ (on omet la dépendance en ω et ξ ci-dessous pour les noyaux) :

$$\begin{aligned}
&R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_1)T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2)\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j)T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon})\\
&\quad = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon})\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{z}_1,\boldsymbol{\upsilon})}\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{z}_1,\boldsymbol{\upsilon})}T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_2-\boldsymbol{\upsilon})\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{z}_2,\boldsymbol{\upsilon})}\cdots\\
&\quad \cdots \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{z}_{j-1},\boldsymbol{\upsilon})}T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1}-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon})\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{z}_j,\boldsymbol{\upsilon})}\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{z}_j,\boldsymbol{\upsilon})}T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{x})\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\upsilon})}
\end{aligned}$$

En reprenant la notation (5.45), il s'ensuit alors :

$$\begin{aligned}
\forall\,\boldsymbol{\upsilon}\in\boldsymbol{\Upsilon},\quad \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\upsilon},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,\xi)&\\
&= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\upsilon},\ldots,\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\upsilon};\omega,\xi)\\
&= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{Z}_1,\ldots,\mathbf{Z}_j;\omega,\xi)
\end{aligned}$$

■

On établit pour finir ce dernier résultat :

Proposition 5.27. *Soient $\beta>0$, $\omega\in\mathbb{R}$ et $z\in\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$.*
Pour tout entier $n\geq 1$ et $L\in[1,\infty)$, soit $(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ le noyau intégral de l'opérateur $\partial_\omega^n\ln(\mathbb{1}+\epsilon z\mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega)})$ (cf. section 4, chapitre 4). Pour tout entier $n\geq 1$, soit $\mathcal{I}_{\infty,n}(\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$ la fonction définie en (5.43). Alors :

$$\forall\,\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3,\quad \mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)=\lim_{L\to\infty}(\partial_\omega^n\mathcal{I}_L)(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$$

Preuve Proposition 5.27.
Soit $(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)\setminus D_\infty$. Soit $L\in[1,\infty)$ choisi suffisamment grand de telle sorte que $(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\Lambda_L\times\Lambda_L)\setminus D_L$ également. En vertu de (5.36), on a :

$$\begin{aligned}
\forall\,\xi\in\Gamma_K,\quad \max\left\{|R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)-R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|,|T_{j,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)-T_{j,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)|\right\}&\\
\leq p(|\xi|)(1+|\omega|)^6\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\{\mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L)+\mathrm{dist}(\mathbf{y},\partial\Lambda_L)\}}&
\end{aligned}$$

L'estimation ci-dessus permet d'obtenir que pour tout $(\mathbf{x},\mathbf{y})\in(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)\setminus D_\infty$:

$$\begin{aligned}
&\lim_{L\to\infty}R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)=R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\\
&\lim_{L\to\infty}T_{j,L}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)=T_{j,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\xi)\quad j\in\{1,2\}
\end{aligned}$$

Etant donné (5.45), il s'ensuit alors que pour tout $j\in\mathbb{N}^*$ et $m\in\mathbb{N}$:

$$\lim_{L\to\infty}\mathcal{K}_L^{j,m}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,\xi)=\mathcal{K}_\infty^{j,m}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,\xi)$$

Puisque la quantité $\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}$ est bornée uniformément en L par (5.47) et que l'on dispose de l'estimation (5.48), il reste à appliquer le théorème de convergence dominée pour conclure.

■

5.2 Preuve du Théorème 5.3

Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ compact tel que $z \in K$. La limite thermodynamique est prise dans le sens indiqué dans le paragraphe 2.1.
Pour cela, on considère la décomposition du cube Λ_L comme $\Lambda_L = \Lambda_{n_L} \cup \Lambda_{n_L}^c$, voir (5.11). Avec (5.45), introduisons de nouvelles notations. Pour $L \in [1, \infty)$ et $n \geq 1$ entier, soient :

$$u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathcal{K}_L^{j,n-k} \tag{5.49}$$

$$v_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}^c} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathcal{K}_L^{j,n-k} \tag{5.50}$$

En vertu de (4.19), les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini s'écrivent :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|} \big\{ u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) + v_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) \big\}$$

A partir de (5.6) et par $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodicité de $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$, cf. (ii) Proposition 5.26 :

$$\begin{aligned}
\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) &= \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta|\Omega|} \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathcal{I}_{\infty,n}(\mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) \\
&= \left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_{n_L}|} n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^{3j}} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k}
\end{aligned}$$

Introduisons pour tout entier $n \geq 1$ les deux quantités suivantes :

$$u_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} \tag{5.51}$$

$$\begin{aligned}
w_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) &:= n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \cdot \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \cdot \\
&\cdot \Bigg\{ \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_2 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} + \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{j-1} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} + \\
&+ \sum_{l'=2}^{j-1} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3 \setminus \Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} + \frac{|\Lambda_{n_L}^c|}{|\Lambda_{n_L}|} \int_{\mathbb{R}^{3j}} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} \Bigg\}
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Avec ces notations, il vient alors :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) = \\
&\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L|} \big\{ [u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - u_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)] + v_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - w_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) \big\} \quad n \in \mathbb{N}^*
\end{aligned}$$

Prouvons maintenant ces deux résultats ce qui achèvera la preuve du Théorème 5.3 :

Lemme 5.28. *Soit $\beta > 0$. Soient $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ et $[\omega_1, \omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$, des compacts. Alors il existe une constante $c_{n,1} = c_1(\beta, K, [\omega_1, \omega_2], n) > 0$ telle que :*

$$\sup_{\omega \in [\omega_1, \omega_2]} \sup_{z \in K} |u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - u_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)| \leq c_{n,1} L^2 \tag{5.53}$$

Lemme 5.29. *Soit $\beta > 0$. Soient $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ et $[\omega_1, \omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$, des compacts. Alors il existe des constantes $c_{n,i} = c_i(\beta, K, [\omega_1, \omega_2], n) > 0$, avec $i \in \{2, 3\}$, telles que pour $L \geq 1$ suffisamment grand :*

$$\sup_{\omega \in [\omega_1, \omega_2]} \sup_{z \in K} |v_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon)| \leq c_{n,2} L^2 \tag{5.54}$$

$$\sup_{\omega \in [\omega_1, \omega_2]} \sup_{z \in K} |w_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)| \leq c_{n,3} L^2 \tag{5.55}$$

Preuve Lemme 5.28.
Utilisant les définitions (5.49) et (5.51) de $u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$ et $u_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$; pour tout $n \in \mathbb{N}^*$:

$$u_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon) - u_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon) =$$
$$n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi \, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z} \left\{ \mathcal{K}_L^{j,n-k} - \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} \right\}$$

En omettant les dépendances en ω et ξ pour les noyaux, on a pour $1 \leq j \leq k \leq n$ entiers :

$$\mathcal{K}_L^{j,n-k} - \mathcal{K}_\infty^{j,n-k} = \frac{\big(i \, \mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!} \Delta_{L,\infty}^j,$$
$$\Delta_{L,\infty}^j := R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdots T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdots T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x})$$

Remarquons que la quantité $\Delta_{L,\infty}^j$, $1 \leq j \leq k \leq n$, peut s'écrire encore :

$$\Delta_{L,\infty}^{j=1} = \big(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1)\big) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{x}) + R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) \big(T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{x}) - T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{x})\big)$$

$$\begin{aligned}\Delta_{L,\infty}^{j=2} = {} & \big(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1)\big) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) T_{i_2,L}(\mathbf{z}_2, \mathbf{x}) + \\ & + R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) \big(T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) - T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)\big) T_{i_2,L}(\mathbf{z}_2, \mathbf{x}) + \\ & + R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \big(T_{i_2,L}(\mathbf{z}_2, \mathbf{x}) - T_{i_2,\infty}(\mathbf{z}_2, \mathbf{x})\big)\end{aligned}$$

et pour tout $j \geq 3$, avec la convention $\mathbf{z}_{j+1} := \mathbf{x}$:

$$\begin{aligned}\Delta_{L,\infty}^j = {} & \big(R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) - R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1)\big) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdots T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) + \\ & + R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) \big(T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) - T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)\big) T_{i_2,L}(\mathbf{z}_2, \mathbf{z}_3) \cdots T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) + \\ & + \sum_{l=2}^{j-1} R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdots \big(T_{i_l,L}(\mathbf{z}_l, \mathbf{z}_{l+1}) - T_{i_l,\infty}(\mathbf{z}_l, \mathbf{z}_{l+1})\big) T_{i_{l+1},L}(\mathbf{z}_{l+1}, \mathbf{z}_{l+2}) \cdots \\ & \cdots T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) + R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1}, \mathbf{z}_j) \big(T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}) - T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x})\big)\end{aligned}$$

La première étape consiste à majorer la quantité $|\Delta^j_{L,\infty}|$ $j \geq 1$, puis $\left|\mathcal{K}^{j,n-k}_L - \mathcal{K}^{j,n-k}_\infty\right|$. Pour cela on va utiliser les estimations (5.35) et (5.36). En posant $\mathbf{z}_0 := \mathbf{x}$, il existe un réél $\delta > 0$ suffisamment petit et un polynôme $p_{j+1}(\cdot)$ tels que :

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |\Delta^j_{L,\infty}| \leq p_{j+1}(|\xi|)(1+|\omega|)^{6+3j}\cdot$$
$$\cdot \left\{2\sum_{s=0}^{j} \chi_{\Lambda^c_{n_L}}(\mathbf{z}_s) + \sum_{s=0}^{j} \mathrm{e}^{-\mathrm{dist}(\mathbf{z}_s,\partial\Lambda_L)}\right\} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}$$

La notation $p_{j+1}(\cdot)$ signifie ici que le degré du polynôme est de la forme $\kappa(j+1)$, $\kappa > 0$. En utilisant les mêmes arguments que ceux menant à la majoration de $|\mathcal{K}^{j,n-k}_\infty|$ dans la preuve de (i) Proposition 5.26, il existe un autre $\delta > 0$ assez petit tel que pour tout $\xi \in \Gamma_K$:

$$\left|\mathcal{K}^{j,n-k}_L - \mathcal{K}^{j,n-k}_\infty\right| = \frac{|\mathrm{Fl}_j(\mathbf{z}_0,\ldots,\mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!}|\Delta^j_{L,\infty}| \leq c(j,n-k)p_{j+1}(|\xi|)(1+|\xi|)^{2(n-k)}\cdot$$
$$\cdot (1+|\omega|)^{6+3j}\left\{2\sum_{s=0}^{j} \chi_{\Lambda^c_{n_L}}(\mathbf{z}_s) + \sum_{s=0}^{j} \mathrm{e}^{-\mathrm{dist}(\mathbf{z}_s,\partial\Lambda_L)}\right\} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}$$

avec $c(j,n-k) := c^{2(n-k)}\frac{\left(j^2(n-k)^2\right)^{n-k}}{(n-k)!}$, $c \geq 1$.
Le reste de la preuve repose sur l'estimation (5.48) qui joue une double rôle. Elle permet non seulement de justifier l'application du théorème de Tonelli aux intégrales ci-dessous :

$$\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \chi_{\Lambda^c_{n_L}}(\mathbf{z}_s)\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} =$$
$$\int_{\Lambda^c_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_s \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s-1}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}}{|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}}{|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}$$

$$\int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{z}_s,\partial\Lambda_L)}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} =$$
$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_s\, \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{z}_s,\partial\Lambda_L)} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s+1} \cdots \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s-1}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}}{|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}}{|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}$$

mais aussi elle fournit l'existence de deux polynômes $q_j(\cdot)$ et $q_j^{'}(\cdot)$, $j \geq s \geq 1$, tels que pour tout $\xi \in \Gamma_K$:

$$\int_{\Lambda^c_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_s \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s-1}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}}{|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}}{|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|} \leq q_j(|\xi|)|\Lambda^c_{n_L}|$$
$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_s\, \mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}\mathrm{dist}(\mathbf{z}_s,\partial\Lambda_L)} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{s-1}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}}{|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_{s+1}|}\cdots\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|}}{|\mathbf{z}_{s-1}-\mathbf{z}_s|} \leq q_j^{'}(|\xi|)L^2$$

où on a utilisé en plus l'estimation (5.29) dans la deuxième intégrale ci-dessus.
En réunissant les résultats ci-dessus, il existe un autre polynôme $p_n(\cdot)$ et une autre

constante $c \geq 1$ tels que :

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |\mathcal{K}_L^{j,n-k} - \mathcal{K}_\infty^{j,n-k}|$$
$$\leq c^n \Big(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!} \Big) (1+|\omega|)^{6+3n} L^2 p_n(|\xi|)$$

Il reste à utiliser la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur Γ_K pour conclure.

■

Preuve Lemme 5.29.
On commence par prouver (5.54). A partir de l'expression (5.50) de $v_L^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$, la première étape consiste à majorer la quantité $|\mathcal{K}_L^{j,n-k}|$, $1 \leq j \leq k \leq n$ entiers. On peut réutiliser les mêmes arguments que ceux de la preuve de (i) Proposition 5.26 menant à la majoration de $|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}|$. Ainsi, il existe $\delta > 0$ assez petit et un polynôme $p_{j+1}(\cdot\,)$ tels que :

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \;\; |\mathcal{K}_L^{j,n-k}| \leq c(j, n-k) p_{j+1}(|\xi|)(1+|\xi|)^{2(n-k)}(1+|\omega|)^{3j+3} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$

Puis en utilisant l'estimation (5.48), il vient l'existence d'un autre polynôme $p_n(\cdot\,)$ et d'une autre constante $c \geq 1$ tels que :

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}^c} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L^j} \mathrm{d}\mathbf{z}\, |\mathcal{K}_L^{j,n-k}|$$
$$\leq c^n \Big(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!} \Big) (1+|\omega|)^{3n+3} |\Lambda_{n_L}^c| p_n(|\xi|)$$

Il reste à utiliser la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur Γ_K pour conclure.

Prouvons maintenant (5.55). A partir de la définition (5.52) de $w_\infty^n(\beta, \omega, z, \epsilon)$, prenons un terme générique. Par exemple, pour $2 \leq l' \leq j-1$:

$$w_{\infty,l'}^n(\beta, \omega, z, \epsilon) := n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} (-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \cdot$$
$$\cdot \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k}$$

On commence par majorer la quantité $|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}|$. Pour cela, on reprend les arguments utilisés dans la preuve de (i) Proposition 5.26. Ainsi, il existe un réél $\delta > 0$ suffisamment petit et un polynôme $p_{j+1}(\cdot\,)$ tels que pour tout $\xi \in \Gamma_K$:

$$|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}| \leq c(j, n-k) p_{j+1}(|\xi|)(1+|\xi|)^{2(n-k)}(1+|\omega|)^{3j+3} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}|}$$

Le reste de la preuve est basé sur l'estimation : il existe un polynôme $q_s(\cdot)$ tel que $\forall\, \xi \in \Gamma_K$:

$$\sup_{\mathbf{z}_0,\mathbf{z}_0'\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_s \, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_0'|}}{|\mathbf{z}_s-\mathbf{z}_0'|} \leq q_s(|\xi|)$$

En effet, elle permet non seulement l'application du théorème de Tonelli (ici $\mathbf{z}_0 := \mathbf{x}$) :

$$\begin{aligned}
\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad & \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{z}_0-\mathbf{z}_1|} \cdots \\
& \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} = \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'-1} \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \cdots \\
& \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'-2} \, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}|}}{|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'}-\mathbf{z}_{l'+1}|}}{|\mathbf{z}_{l'}-\mathbf{z}_{l'+1}|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'-2}-\mathbf{z}_{l'-1}|}}{|\mathbf{z}_{l'-2}-\mathbf{z}_{l'-1}|}
\end{aligned}$$

mais aussi, elle fournit l'existence d'un autre polynôme $q_j(\cdot)$ tel que :

$$\begin{aligned}
\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad & \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'-1} \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}|}}{|\mathbf{z}_{l'-1}-\mathbf{z}_{l'}|} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_0 \cdots \\
& \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'-2} \, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'}-\mathbf{z}_{l'+1}|}}{|\mathbf{z}_{l'}-\mathbf{z}_{l'+1}|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|}}{|\mathbf{z}_j-\mathbf{z}_0|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_{l'-2}-\mathbf{z}_{l'-1}|}}{|\mathbf{z}_{l'-2}-\mathbf{z}_{l'-1}|} \leq q_j(|\xi|)L^2
\end{aligned}$$

où on a utilisé le résultat du Lemme 5.23. Il vient alors l'existence d'un autre polynôme $p_n(\cdot)$ et d'une autre constante $c \geq 1$ tels que :

$$\begin{aligned}
\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad & \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_{n_L}} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1} \cdots \\
& \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \, |\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}| \leq c^n \Bigg(\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \frac{\left(j^2(n-k)^2\right)^{n-k}}{(n-k)!} \Bigg) (1+|\omega|)^{3n+3} L^2 p_n(|\xi|)
\end{aligned}$$

Il reste à utiliser la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}(\beta, z; \cdot)$ sur le contour Γ_K pour obtenir :

$$\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]} \sup_{z\in K} |w_{\infty,l'}^n(\beta,\omega,z,\epsilon)| \leq c(\beta, K, [\omega_1,\omega_2], n)L^2$$

■

5.3 Preuve des Corollaires 5.4 et 5.5

Preuve Corollaire 5.4.
Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon$. D'après les théorèmes généraux sur les suites de fonctions, les résultats du Corollaire 5.4 sont une conséquence de :
(1). $\{P_L(\beta, \cdot, z, \epsilon)\}_{L\geq 1}$ est une suite de fonctions de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathbb{R}$.
(2). $\forall\, n \in \mathbb{N}^*$, la suite de fonctions $\{(\partial_\omega^n P_L)(\beta, \cdot, z, \epsilon)\}_{L\geq 1}$ converge simplement sur $\mathbb{R}$.
(3). $\forall\, n \in \mathbb{N}^*$, la suite de fonctions $\{(q/c)^n(\partial_\omega^n P_L)(\beta, \cdot, z, \epsilon)\}_{L\geq 1}$ converge uniformément sur tout segment de $\mathbb{R}$ vers $\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \cdot, z, \epsilon)$, voir Théorème 5.3.

■

Preuve Corollaire 5.5.
Le Théorème 5.3 donne en particulier que pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$:

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} \sup_{z\in K} |\mathcal{X}_L^n(\beta,\omega,z,\epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0 \quad \beta > 0,\ \omega \in \mathbb{R}$$

Il suffit d'appliquer le Théorème 5.17 à la suite de fonctions $\{\mathcal{X}_L^n(\beta,\omega,\cdot\,,\epsilon)\}_{L\geq 1}$ analytiques sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ convergeant uniformément sur tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ vers $\mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,z,\epsilon)$ étant donné que $\mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,z,\epsilon) = (q/c)^n(\partial_\omega^n P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$ (cf. Corollaire 5.4).

■

5.4 Preuve du Théorème 5.6 et du Corollaire 5.7

Preuve Théorème 5.6.
Pour $\beta > 0$, introduisons les intervalles $\hat{I}_\epsilon = \hat{I}_\epsilon(E_0(0))$ définis par :

$$\hat{I}_{-1} := \mathcal{D}_{-1} \cap \mathbb{R} = (-\infty, \mathrm{e}^{\beta E_0(0)}), \quad \hat{I}_{+1} := \mathcal{D}_{+1} \cap \mathbb{R} = (-\mathrm{e}^{\beta E_0(0)}, +\infty)$$

Soient $z \in \hat{I}_\epsilon$ et $K \subset \hat{I}_\epsilon$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Soit α un réél vérifiant $-\infty < \alpha \leq E_0(0)$ tel que $K \subset \hat{I}_\epsilon(\alpha)$. Par les mêmes arguments que ceux utilisés dans la preuve du Lemme 1.39, $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) := \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$ est holomorphe sur le domaine :

$$\hat{\mathfrak{C}} := \{\xi \in \mathbb{C} \,:\, \Im\xi \in (-\pi/\beta, \pi/\beta),\ \Re\xi \geq \alpha\}$$

Posons $(\partial_z^0 \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\cdot\,) := \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$. Utilisons que pour tout entier $m \geq 1$:

$$(\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\xi) = (m-1)!(-1)^{m+1}\frac{\epsilon^m \mathrm{e}^{-m\beta\xi}}{(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})^m} \quad m \in \mathbb{N}^*$$

Pour tout $m \in \mathbb{N}$, la fonction $\xi \mapsto (\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\xi)$ est encore holomorphe sur le domaine $\hat{\mathfrak{C}}$. Introduisons le contour $\hat{\gamma}$, orienté positivement et contournant $[E_0(0),+\infty)$, défini par :

$$\hat{\gamma} := \Big\{\delta + iy \,:\, y \in \Big[-\frac{\pi}{2\beta}, \frac{\pi}{2\beta}\Big]\Big\} \cup \Big\{x \pm i\frac{\pi}{2\beta} \,:\, x \geq \alpha\Big\} \quad -\infty < \alpha < E_0(0)$$

Le contour $\hat{\gamma}$ est inclus dans le domaine d'holomorphie $\hat{\mathfrak{C}}$ de $(\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\cdot\,)$, avec $m \in \mathbb{N}$. De plus, $(\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\cdot\,)$ décroît exponentiellement sur le contour $\hat{\gamma}$ pour $\Re\xi > 0$ assez large.

Pour tout $\omega \in \mathbb{R}$ et pour tout entier $m \geq 0$ et $n \geq 1$, introduisons les quantités :

$$\mathcal{Y}_\infty^{n,m}(\beta,\omega,z,\epsilon) := n!\Big(\frac{q}{c}\Big)^n \frac{i}{2\pi}\frac{\epsilon}{\beta|\Omega|}\int_{\hat{\gamma}} \mathrm{d}\xi\, (\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\xi) \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^k (-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j)\cdot$$

$$\cdot \int_\Omega \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!} R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\xi) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\xi)\cdots$$

$$\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\xi) T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\xi)$$

où dans le cas $m = 0$, $\mathcal{Y}_\infty^{n,0}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,z,\epsilon)$ pour tout entier $n \geq 1$, voir (5.6). En reprenant les arguments utilisés dans la preuve de la Proposition 5.26, ces quantités sont bien définies (l'ingrédient principal est la décroissance exponentielle de $(\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta,z;\cdot\,)$ sur le contour $\hat{\gamma}$ pour $\Re\xi > 0$ assez large).

Comme corollaire du Théorème 5.3, on établit le résultat suivant :

Corollaire 5.30. *Soit $\beta > 0$. Alors pour tout compact $K \subset \hat{I}_\epsilon$ et pour tout compact $[\omega_1, \omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$:*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} \sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]} \sup_{z\in K} |(\partial_\omega^n \partial_z^m P_L)(\beta,\omega,z,\epsilon) - \mathcal{Y}_\infty^{n,m}(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0 \quad m \in \mathbb{N}$$

Preuve Corollaire 5.30.
La preuve utilise exactement la même méthode et les mêmes arguments que ceux utilisées dans la preuve du Théorème 5.3 en substituant $(\partial_z^m \mathfrak{f}_\epsilon)(\beta, z; \cdot\,)$ à $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$.

■

Ce résultat a deux conséquences immédiates (voir preuve du Corollaire 5.4).
D'une part, pour tout $z \in \hat{I}_\epsilon$, $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto (\partial_z^m P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$, $m \in \mathbb{N}$, est de classe $\mathcal{C}^\infty$ et :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad (\partial_\omega^n \partial_z^m P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon) = \mathcal{Y}_\infty^{n,m}(\beta,\omega,z,\epsilon) \quad m \in \mathbb{N}$$

D'autre part, $(\omega, z) \mapsto (\partial_\omega^n \partial_z^m P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$, $m \in \mathbb{N}$ et $n \in \mathbb{N}^*$, est continue sur $\mathbb{R} \times \hat{I}_\epsilon$.

Rappelons que d'après le Corollaire 5.4, $\hat{I}_\epsilon \ni z \mapsto (\partial_\omega^n P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$. On peut également démontrer que pour tout compact $[\omega_1, \omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$, et pour tout compact $K \subset \hat{I}_\epsilon$ (avec $\mathcal{X}_L^0(\beta,\omega,z,\epsilon) := P_L(\beta,\omega,z,\epsilon)$, $1 \le L \le \infty$) :

$$\forall\, m \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} \sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]} \sup_{z\in K} |(\partial_z^m \mathcal{X}_L^n)(\beta,\omega,z,\epsilon) - (\partial_z^m \mathcal{X}_\infty^n)(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0 \quad n \in \mathbb{N}$$

Par suite, $(\omega, z) \mapsto (\partial_z^m \partial_\omega^n P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$, avec $m \in \mathbb{N}^*$ et $n \in \mathbb{N}$, est continue sur $\mathbb{R} \times \hat{I}_\epsilon$.

Il reste à utiliser que pour tout entier n, m tels que $n + m \ge 1$, on a les identités :

$$(\partial_\omega^n \partial_z^m P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon) = \mathcal{Y}_\infty^{n,m}(\beta,\omega,z,\epsilon) = (\partial_z^m \partial_\omega^n P_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon), \quad \omega \in \mathbb{R},\ z \in \hat{I}_\epsilon$$

ce qui garantit que $(\omega, z) \mapsto P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathbb{R} \times \hat{I}_\epsilon$.

■

Preuve Corollaire 5.7.
Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon$. $P_\infty(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)$ étant limite simple de la suite $\{P_L(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)\}_{L\ge1}$ de fonctions paires (voir Lemme 4.18), il s'ensuit que $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto P_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est paire. Il reste à écrire le développement de Taylor de $P_\infty(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)$ autour de $\omega = 0$ pour conclure.

■

6 Appendice 1 : limites thermodynamiques à densité fixée

Dans cet appendice, on s'intéresse aux limites thermodynamiques des grandeurs grand-canonique caractéristiques de la réponse (dia)magnétique du gaz quasi-parfait lorsque la densité de particules $\rho_0 > 0$ devient un paramètre fixé. Avec la température $T > 0$, ce sont les deux paramètres extérieurs usuellement considérés dans les problèmes physiques.

Dans une première partie, on démontre l'existence de ces limites thermodynamiques à partir des définitions et propriétés des quantités grand-canonique à volume fini et à densité

fixée introduites dans l'appendice 2 du chapitre 2, ainsi que des résultats énoncés dans la section "résultats principaux" de ce chapitre. Dans une seconde partie, on donne les relations liant la première dérivée partielle (respectivement seconde) par rapport à l'intensité du champ magnétique de la transformée de Legendre de la limite thermodynamique de la pression grand-canonique, à la limite thermodynamique de l'aimantation (respectivement susceptibilité magnétique) grand-canonique à densité fixée.

Comme dans les paragraphes précédents, on supposera que V est une fonction à valeurs réélles $\boldsymbol{\Upsilon}$-périodique et $V \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, $\epsilon_0 > 0$.

6.1 Limites thermodynamiques des grandeurs à densité fixée

Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient I_ϵ et J_ϵ, avec $\epsilon = \pm 1$, les intervalles définis par :

$$I_{-1} = I_{-1}(\omega) := \mathcal{D}_{-1}(E_0(\omega)) \cap \mathbb{R}^*_+ = (0, \mathrm{e}^{\beta E_0(\omega)}), \quad I_{+1} := \mathcal{D}_{+1}(E_0(\omega)) \cap \mathbb{R}^*_+ = (0, +\infty)$$
$$J_{-1} = J_{-1}(\omega) := (-\infty, E_0(\omega)), \quad J_{+1} := (-\infty, +\infty)$$

On suppose que la densité $\rho_0 > 0$ est prise comme paramètre extérieur.
Soient $P_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ et $\mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ avec $n \in \mathbb{N}^*$, la pression et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini et à densité fixée (voir appendice 2, chapitre 2) :

$$P_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := P_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon), \quad \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon) \;\; n \in \mathbb{N}^*$$

où $\mu_L = \mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ est l'unique solution de $\rho_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$, voir Lemme 2.27.

En l'absence de confinement, la densité de particules pour le gaz de fermions peut être choisie quelconque dans l'intervalle $(0, +\infty)$. Cela peut éventuellement ne pas être le cas pour le gaz de bosons lorsque celui-ci manifeste le phénomène de condensation de Bose-Einstein, correspondant à une accumulation macroscopique de particules sur un ou plusieurs niveaux d'énergie, caractérisé par l'existence d'une valeur critique pour la densité :

Définition 5.31. *Pour $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\mu \in J_{-1}$, soit $\rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, -1)$ la limite thermodynamique de la densité grand-canonique pour le gaz de bosons, voir* (5.3).
Soit $\rho_c(\beta, \omega) \in \mathbb{R}^*_+ \cup \{+\infty\}$ la densité critique définie par :

$$\rho_c(\beta, \omega) := \lim_{\mu \to E_0(\omega)} \rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, -1) \tag{5.56}$$

On dit qu'il y a condensation de Bose-Einstein de type I (accumulation de particules sur le niveau d'énergie le plus bas) si $\rho_c(\beta, \omega) < +\infty$.

Rappelons que dans le cas du gaz parfait (non-confiné) de bosons ($V = 0$) et en l'absence de champ magnétique ($\omega = 0$), le phénomène de condensation est présent (voir [55]).
Toujours dans le cas du gaz parfait mais en présence de champ magnétique ($\omega \neq 0$), le phénomène de condensation est absent (voir par ex. [6]). Etant donné les hypothèses que nous considérons ici sur le potentiel V, il n'existe pas de critère permettant de déterminer la présence ou non de condensation (pour davantage de détails, voir [20]).

Avec $\rho_c(\beta, \omega) \in \mathbb{R}^*_+ \cup \{+\infty\}$ défini en (5.56), introduisons les intervalles M_ϵ, avec $\epsilon = \pm 1$:

$$M_{+1} := (0, +\infty), \quad M_{-1} = M_{-1}(\omega) := (0, \rho_c(\beta, \omega))$$

Voici le résultat principal de ce paragraphe :

Théorème 5.32. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$. Alors :*

$$\lim_{L\to\infty} P_L(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) := P_\infty(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) = P_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu_\infty},\epsilon)$$
$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^n(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) := \mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) = \mathcal{X}_\infty^n(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu_\infty},\epsilon)$$

où $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) \in J_\epsilon$ est l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon) = \rho_0$.

Le reste de ce paragraphe est consacré à la preuve du Théorème 5.32.
On a vu dans l'appendice 2 du chapitre 2 que les définitions de la pression et des susceptibilités grand-canonique à volume fini et à densité fixée reposaient sur la possibilité d'inverser la relation liant la fugacité à la densité grand-canonique. On montre ci-dessous qu'il est également possible d'inverser la relation fugacité-densité en limite thermodynamique :

Proposition 5.33. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$.*
Soit $\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ la limite thermodynamique de la densité grand-canonique, voir (5.3). *Alors il existe un unique $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta,\omega,\rho_0,\epsilon) \in J_\epsilon$ solution de l'équation :*

$$\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon) = \rho_0 \tag{5.57}$$

La preuve de la Proposition 5.33 repose sur le lemme suivant :

Lemme 5.34. *Pour tout $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$, la fonction $J_\epsilon \ni \mu \mapsto \rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est strictement croissante.*

Preuve Lemme 5.34.
Vue comme une fonction de la variable μ, $P_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\cdot},\epsilon)$ est limite simple de la suite $\{P_L(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\cdot},\epsilon)\}_{L\geq 1}$ de fonctions convexes (cf. Théorème 5.1 et Proposition 2.17). Par conséquent, $\mu \mapsto P_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est une fonction convexe. Il s'ensuit alors que $J_\epsilon \ni \mu \mapsto \rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est monotone croissante et sa dérivée et de signe constant positif :

$$\forall\, \mu \in J_\epsilon, \quad \frac{\partial \rho_\infty}{\partial \mu}(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon) \geq 0 \tag{5.58}$$

En tant que limite uniforme sur les compacts en z de la suite $\{\rho_L(\beta,\omega,\cdot,\epsilon)\}_{L\geq 1}$ de fonctions analytiques, $z \mapsto \rho_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est analytique sur $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, voir Corollaire 5.2.
Le théorème des zéros isolés (voir [26]) garantit que si la fonction $z \mapsto (\partial_z\rho_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$ possède des zéros, ceux-ci ne peuvent être que des points isolés de $\mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$, sans quoi $(\partial_z\rho_\infty)(\beta,\omega,\cdot,\epsilon)$ serait identiquement nulle. Par conséquent, $I_\epsilon \ni z \mapsto \beta z(\partial_z\rho_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$ ne peut s'annuler qu'en des points isolés ; même chose pour $J_\epsilon \ni \mu \mapsto (\partial_\mu\rho_\infty)(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ puisque $(\partial_\mu\rho_\infty)(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon) = \beta z(\partial_z\rho_\infty)(\beta,\omega,z,\epsilon)$. Cet argument combiné avec (5.58) permet de conclure que la fonction $J_\epsilon \ni \mu \mapsto \rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est strictement croissante.

■

Preuve Proposition 5.33.
D'une part la fonction $\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\cdot},\epsilon)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$, et même analytique réélle, par rapport à la variable μ comme composée de fonctions analytiques réélles, voir [60].
D'autre part, $\mu \mapsto \rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\mu},\epsilon)$ est strictement croissante sur son ensemble de définition d'après le Lemme 5.34. Le théorème d'inversion globale assure que $\rho_\infty(\beta,\omega,\mathrm{e}^{\beta\cdot},\epsilon)$ est un $\mathcal{C}^\infty$ -difféomorphisme de J_ϵ sur M_ϵ.

■

Avant de prouver le Théorème 5.32, on a besoin du lemme suivant :

Lemme 5.35. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$. Soient $\mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$, $L \in [1, \infty)$, l'unique solution de $\rho_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$ et $\mu_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ l'unique solution de (5.57). Alors la suite $\{\mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)\}_{L\geq 1}$ converge vers $\mu_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ lorsque $L \to \infty$.*

Preuve Lemme 5.35.
On utilise la notation raccourcie $\mu_L = \mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$, avec $L \in [1, \infty]$.
Le lemme sera prouvé si on démontre l'inégalité :

$$\mu_\infty \leq \mu_1 := \liminf_{L\to\infty} \mu_L \leq \mu_2 := \limsup_{L\to\infty} \mu_L \leq \mu_\infty \tag{5.59}$$

On commence par démontrer la première inégalité (celle de gauche) par contraposé.
Suppsons que $\mu_1 := \liminf_{L\to\infty} \mu_L < \mu_\infty$. Alors il existe $\eta > 0$ et une suite divergente $\{L_n\}_{n\geq 1}$ telle que :

$$\lim_{n\to\infty} \mu_{L_n} = \mu_1 \quad \text{et} \quad \mu_{L_n} \leq \mu_\infty - \eta \quad \forall\, n \geq 1$$

Vue comme une fonction de μ, $\rho_{L_n}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)$ est une fonction croissante. Par suite :

$$\rho_0 = \rho_{L_n}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_{L_n}}, \epsilon) \leq \rho_{L_n}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta(\mu_\infty - \eta)}, \epsilon) \quad \forall\, n \geq 1$$

Comme la suite de fonctions $\{\rho_{L_n}(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)\}_{n\geq 1}$ converge uniformément vers $\rho_\infty(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ sur les compacts en z, on obtient (voir méthode dans la preuve du Théorème 5.32) :

$$\rho_0 = \rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_1}, \epsilon) \leq \rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta(\mu_\infty - \eta)}, \epsilon) < \rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) = \rho_0$$

où on a utilisé dans la seconde inégalité (la stricte) que $\rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\cdot}, \epsilon)$ est une fonction strictement croissante d'après le Lemme 5.34. On arrive alors à une contradiction. Par conséquent, $\mu_\infty \leq \mu_1$. La seconde inégalité dans (5.59) se démontre aussi par contraposé.

■

Preuve Théorème 5.32.
Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$. On utilise la notation raccourcie $\mu_L = \mu_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ et on posera $P_L(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon) := \mathcal{X}_L^0(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$, $L \in [1, \infty]$. Pour tout $n \in \mathbb{N}$, on montre que :

$$\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := \lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon)$$

Soit $\delta > 0$ fixé. Partons de l'inégalité :

$$\begin{aligned} &|\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) - \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)| \\ &\qquad \leq |\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon)| + |\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon) - \mathcal{X}_L^n(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)| \end{aligned}$$

La fonction $\mu \mapsto \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)$ étant continue,

$$\exists\, \eta > 0 \text{ t.q. } \forall\, \mu \in J_\epsilon,\ |\mu - \mu_\infty| \leq \eta \implies |\mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) - \mathcal{X}_\infty^n(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)| \leq \frac{\delta}{2}$$

D'après le Lemme 5.35, la suite $\{\mu_L\}_{L\geq 1}$ converge vers μ_∞, i.e. il existe un rang $L_1 \geq 1$ tel que pour tout $L \geq L_1$, $|\mu_L - \mu_\infty| \leq \eta$. Il s'ensuit :

$$\forall\, L \geq L_1, \quad |\mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) - \mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon)| \leq \frac{\delta}{2} \tag{5.60}$$

Soit $K \subset I_\epsilon$ un compact tel que $\mathrm{e}^{\beta\mu_\infty} \in K$. Par convergence de la suite $\{\mu_L\}_{L\geq 1}$, il existe un rang $L_2 \geq 1$ tel que pour tout $L \geq L_2$, $\mathrm{e}^{\beta\mu_L} \in K$. Aussi :

$$|\mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon) - \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_L}, \epsilon)| \leq \sup_{z\in K} |\mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, z, \epsilon)|$$

Et d'après le Théorème 5.3, il existe un rang $L_3 \geq 1$ tel que :

$$\forall\, L \geq L_3, \quad \sup_{z\in K} |\mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) - \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, z, \epsilon)| \leq \frac{\delta}{2} \tag{5.61}$$

Etant donné (5.60) et (5.61), en posant $L_0 := \max\{L_1, L_2, L_3\} \geq 1$, il vient :

$$\forall\, L \geq L_0, \quad |\mathcal{X}^n_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) - \mathcal{X}^n_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)| \leq \delta$$

■

6.2 Transformée de Legendre de la limite thermodynamique de la pression grand-canonique

Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$. En vertu de la Proposition 5.33, introduisons la transformée de Legendre de la limite thermodynamique de la pression grand-canonique :

$$\mathcal{F}_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) := \sup_{\mu\in J_\epsilon} \big(\rho_0\mu - P_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)\big) = \rho_0\mu_\infty - P_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) \tag{5.62}$$

où $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) \in J_\epsilon$ est l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) = \rho_0$.

Voici le résultat principal de ce paragraphe :

Proposition 5.36. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 \in M_\epsilon$.*
Soit $\mathcal{F}_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$, $L \in [1, \infty)$, la transformée de Legendre de la pression grand-canonique à volume fini, voir (2.58). *Soit $\mathcal{F}_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$ la transformée de Legendre de la limite thermodynamique de pression grand-canonique, voir* (5.62).
Alors on a les convergences simples suivantes :

$$\lim_{L\to\infty} \mathcal{F}_L(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = \mathcal{F}_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon), \quad \lim_{L\to\infty} \frac{\partial \mathcal{F}_L}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = \frac{\partial \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$$
$$\lim_{L\to\infty} \frac{\partial^2 \mathcal{F}_L}{\partial \omega^2}(\beta, \omega = 0, \rho_0, \epsilon) = \frac{\partial^2 \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega^2}(\beta, \omega = 0, \rho_0, \epsilon)$$

Le reste de ce paragraphe est consacré à la preuve de la Proposition 5.36.
Compte-tenu des identités établies dans la Proposition 2.26 et du Théorème 5.32, il suffit de montrer ces deux identités :

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = -\left(\frac{c}{q}\right)\mathcal{X}^1_\infty(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon), \quad \frac{\partial^2 \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega^2}(\beta, 0, \rho_0, \epsilon) = -\left(\frac{c}{q}\right)^2 \mathcal{X}^2_\infty(\beta, 0, \rho_0, \epsilon)$$

On a besoin pour cela du lemme suivant :

Lemme 5.37. *Pour tout $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $\mu \in J_\epsilon$:*

$$\frac{\partial \rho_\infty}{\partial \mu}(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon) > 0 \tag{5.63}$$

Preuve Lemme 5.37.
D'une part, il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}_\epsilon$ de I_ϵ tel que $\Re\{(\partial_z \rho_L)(\beta, \omega, z, \epsilon)\} > 0$ pour tout $z \in \mathcal{V}_\epsilon$. Ceci est une conséquence de (2.57) et de la continuité de $(\partial_z \rho_L)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$. D'autre part, en tant que limite uniforme sur les compacts en z de la suite de fonctions analytiques $\{(\partial_z \rho_L)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)\}_{L \geq 1}$, $z \mapsto (\partial_z \rho_\infty)(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est analytique sur $\mathcal{V}_\epsilon$ (cf. Corollaire 5.2). Le Théorème d'Hurwitz (voir Théorème 5.68 en annexe) permet de conclure que soit $(\partial_z \rho_\infty)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ est identiquement nulle, soit $(\partial_z \rho_\infty)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ ne possède pas de zéro dans $\mathcal{V}_\epsilon$. Supposons que $(\partial_z \rho_\infty)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ soit identiquement nulle sur $\mathcal{V}_\epsilon$. Par conséquent, $\beta z (\partial_z \rho_\infty)(\beta, \omega, \cdot\,, \epsilon)$ est identiquement nulle sur I_ϵ. Or $J_\epsilon \ni \mu \mapsto (\partial_\mu \rho_\infty)(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)$ est strictement croissante d'après le Lemme 5.34. On conclut que $J_\epsilon \ni \mu \mapsto (\partial_\mu \rho_\infty)(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \epsilon)$ ne s'annule jamais.

■

Preuve Proposition 5.36.
On reprend point par point les arguments utilisés dans la preuve de la Proposition 2.26. Justifié par le Théorème 5.6, l'application du théorème des fonctions implicites à la fonction $(\omega, \mu) \mapsto \rho_\infty(\beta, \omega, \mu, \epsilon) - \rho_0$ assure que $\mathcal{F}_\infty(\beta, \cdot\,, \rho_0, \epsilon)$ est localement de classe $\mathcal{C}^\infty$.
En utilisant d'abord que $(\partial_\mu P_\infty)(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon) = \rho_\infty(\beta, \omega, \mu_\infty, \epsilon) = \rho_0$, on obtient :

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) = \rho_0 \frac{\partial \mu_\infty}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon) - \frac{\partial P_\infty}{\partial \omega}\big(\beta, \omega, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon\big) - \rho_0 \frac{\partial \mu_\infty}{\partial \omega}(\beta, \omega, \rho_0, \epsilon)$$

Puis en dérivant une seconde fois :

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}_\infty}{\partial \omega^2}(\beta, \omega = 0, \rho_0, \epsilon) = -\frac{\partial^2 P_\infty}{\partial \omega^2}\big(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon\big) - \frac{\partial \mu_\infty}{\partial \omega}(\beta, 0, \rho_0, \epsilon) \frac{\partial^2 P_\infty}{\partial \mu \partial \omega}\big(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon\big)$$

Pour conclure, il reste à utiliser que $(\partial_\omega \mu_\infty)(\beta, 0, \rho_0, \epsilon) = 0$. Ceci est une conséquence du théorème des fonctions implicites compte-tenu de (5.63) :

$$(\partial_\omega \mu_\infty)(\beta, 0, \rho_0, \epsilon) = -(\partial_\omega \rho_\infty)(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon)\big((\partial_\mu \rho_\infty)(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \epsilon)\big)^{-1}$$

et de la parité de $\omega \mapsto \rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon)$ comme limite simple de la suite $\{\rho_L(\beta, \cdot\,, z, \epsilon)\}_{L \geq 1}$ de fonctions paires (voir Lemme 4.18).

■

7 Appendice 2 : limites thermodynamiques pour le modèle d'Anderson

Un potentiel type Anderson est généralement utilisé en physique du solide pour modéliser un alliage, c'est-à-dire un réseau cristallin idéal et infini constitué d'ions d'espèces différentes (i.e. portant des charges électriques différentes). En général ces différents types d'ions ne sont pas distribués de façon régulière sur le réseau cristallin mais plutôt de manière aléatoire. Le potentiel électrique "ressenti" par une particule chargée se trouvant à

l'intérieur du réseau est la superposition des potentiels générés par chacun ions fixés aux nœuds du réseau. Dans le modèle d'Anderson la charge électrique de ces ions joue le rôle de variable aléatoire pouvant prendre des valeurs sur un ensemble (in)fini.

Le premier objectif de cet appendice est de prouver l'existence des limites thermodynamiques des grandeurs grand-canonique caractéristiques de la réponse (dia)magnétique du gaz quasi-parfait lorsque le potentiel électrique est un potentiel aléatoire du type Anderson. Ceci couvre par exemple le cas d'un gaz d'électrons de conduction dans un alliage.

Le second objectif (le plus important) est de mettre en application la théorie des opérateurs de Schrödinger aléatoires et ses techniques à la mécanique statistique quantique.

Avant d'énoncer les résultats principaux, rappelons quelques définitions et résultats de la théorie des opérateurs de Schrödinger aléatoires (on utilisera la terminologie de [62]).

7.1 Potentiel type Anderson et opérateurs de Schrödinger aléatoires

Soit $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé complet, formé d'un ensemble N (univers), d'une σ-algèbre $\mathfrak{A}$ sur N et d'une mesure de probabilité $\mathbb{P}$ sur cette σ-algèbre telle que $\mathbb{P}(N) = 1$. Par la suite, on notera $\mathbb{E}[\cdot\,] := \int_N (\cdot\,)\mathrm{d}\mathbb{P}(\eta)$ l'espérance induite par la mesure de probabilité $\mathbb{P}$. On appelera variable aléatoire une fonction mesurable sur N et on désignera par champ scalaire aléatoire une fonction $g : N \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ jointement mesurable par rapport au produit de la σ-algèbre $\mathfrak{A}$ des ensembles d'évènements dans N et de la σ-algèbre $\mathcal{B}(\mathbb{R}^3)$ des ensembles de Borel dans $\mathbb{R}^3$. On notera $g(\eta, \mathbf{x}) = g_\eta(\mathbf{x})$.

On définit le potentiel type Anderson comme le champ scalaire aléatoire dont les réalisations sont données par :

$$V_\eta(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{i}}(\eta) u(\mathbf{x} - \mathbf{i}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \tag{5.64}$$

avec $\{\lambda_{\mathbf{i}}\}_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3}$ une famille de variables aléatoires sur l'espace probabilisé $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$.

Par la suite, on se placera sous l'hypothèse (**H3"**) dans laquelle on suppose :

Hypothèse (H3").
(i). Les variables aléatoires $\lambda_{\mathbf{i}}$ sont $\mathbb{P}$-indépendantes et identiquement distribuées (i.i.d.).
(ii). Les $\lambda_{\mathbf{i}}$ sont continuement distribuées sur un intervalle borné I avec une densité bornée :

$$\mathbb{P}(\lambda_{\mathbf{0}}(\eta) \in [a, b]) = \int_a^b \mathrm{d}q\, f(q), \quad \|f\|_\infty < +\infty$$

(iii). La fonction de site $u(\cdot\,)$ vérifie les conditions de Birman-Solomyak (voir [56], [57]), i.e. $u \in l^1(L^{3+\epsilon_0})$ avec :

$$l^1(L^p) := \left\{ f \in L^p_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3) \ : \ \sum_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3} \left(\int_{\Omega(\mathbf{j})} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |u(\mathbf{x})|^p \right)^{\frac{1}{p}} < +\infty, \ \infty > p \geq 1 \right\}$$

où $\Omega(\mathbf{j})$ désigne le cube ouvert unité centré sur le site $\mathbf{j} \in \mathbb{Z}^3$.

Remarque 5.38. Le fait d'avoir choisi les $\lambda_{\mathbf{i}}$ i.i.d. sera justifié par la suite.
De manière imagée, l'indépendance pour les variables aléatoires $\lambda_{\mathbf{i}}$ signifie que $\lambda_{\mathbf{j}}$ et $\lambda_{\mathbf{k}}$ ne s'influencent "pas trop" pour $|\mathbf{j} - \mathbf{k}|$ assez grand. Et identiquement distribuée signifie que la loi de probabilité est la même en tout point du réseau (voir [62]).

Remarque 5.39. En munissant $L^p_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ de la norme équivalente (5.7), les hypothèses (ii) et (iii) assurent que $V_\eta \in L^{3+\epsilon_0}_{\text{uloc}}(\mathbb{R}^3)$ $\forall\, \eta \in N$ avec $\|V\|_{3+\epsilon_0,\text{uloc}} \leq c$ uniforme en $\eta \in N$.

Rappelons maintenant la définition d'un champ aléatoire (à valeurs réélles ou complexes) stationnaire ergodique (voir par ex. [62], [56], [57]) :

Définition 5.40. *Un champ aléatoire $g_\eta(\cdot\,)$ est dit $\mathbb{G}^3$-ergodique (ou $\mathbb{G}^3$-métriquement transitif, terminologie [84]), avec $\mathbb{G} = \mathbb{Z}$ ou $\mathbb{R}$, si ces deux conditions sont réalisées :*
(i). Sur $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ il existe un groupe d'automorphismes $\{\tau_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{G}^3}$ préservant la mesure, i.e. $\mathbb{P}(\tau_{\mathbf{v}}^{-1}A) = \mathbb{P}(A)$ pour tout $A \in \mathfrak{A}$ et $\mathbf{v} \in \mathbb{G}^3$, tel que :

$$\forall\, \mathbf{v} \in \mathbb{G}^3, \quad g_{\tau_{\mathbf{v}}\eta}(\mathbf{x}) = g_\eta(\mathbf{x} - \mathbf{v}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3,\ \eta \in N$$

(ii). $\{\tau_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{G}^3}$ est ergodique, c'est-à-dire tout ensemble $A \in \mathfrak{A}$ qui est invariant sous $\{\tau_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{G}^3}$ (i.e. $\tau_{\mathbf{v}}^{-1}A = A$ pour tout $\mathbf{v} \in \mathbb{G}^3$) a une probabilité 0 ou 1.

Remarque 5.41. Si seulement (i) est vérifiée, $g_\eta(\cdot\,)$ est dit $\mathbb{G}^3$-stationnaire.

L'hypothèse i.i.d. pour les variables aléatoires $\lambda_{\mathbf{i}}$ dans (5.64) est essentielle puiqu'elle assure que $\{\lambda_{\mathbf{i}}\}_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3}$, vu comme un champ aléatoire sur $\mathbb{Z}^3$, est $\mathbb{Z}^3$-ergodique (voir [62]). Il existe alors un groupe de transformations ergodiques $\{\tau_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{Z}^3}$ préservant la mesure sur $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ tel que :

$$\lambda_{\mathbf{i}}(\tau_{\mathbf{v}}\eta) = \lambda_{\mathbf{i}-\mathbf{v}}(\eta) \quad \mathbf{v} \in \mathbb{Z}^3 \tag{5.65}$$

Il s'ensuit que V_η est un champ scalaire aléatoire $\mathbb{Z}^3$-ergodique (cf. Définition 5.40) :

$$V_{\tau_{\mathbf{v}}\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{i}-\mathbf{v}}(\eta)u(\mathbf{x} - \mathbf{i}) = \sum_{\mathbf{j}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{j}}(\eta)u(\mathbf{x} - \mathbf{j} - \mathbf{v}) = V_\eta(\mathbf{x} - \mathbf{v})$$

Remarque 5.42. De manière imagée, la $\mathbb{Z}^3$-stationnarité pour V_η signifie que le réseau cristallin est "en moyenne" homogène. La $\mathbb{Z}^3$-ergodicité signifie que les réalisations de V_η aux points $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ sont "presque statistiquement indépendantes" pour $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ assez grand.

Bien que le potentiel type Anderson (5.64) ne soit que $\mathbb{Z}^3$-ergodique, on peut le rendre artificiellement $\mathbb{R}^3$-ergodique. On utilise pour cela la "technique de suspension", voir [61].

Considérons le nouvel espace probabilisé $(\tilde{N}, \tilde{\mathfrak{A}}, \tilde{\mathbb{P}})$ formé du produit de l'espace probabilisé $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ du champ aléatoire $\{\lambda_{\mathbf{i}}\}$ avec l'espace probabilisé $(\Omega, \mathfrak{A}_0, \mathbb{P}_0)$ d'une variable aléatoire $\boldsymbol{\theta}$ indépendante du champ $\{\lambda_{\mathbf{i}}\}$ et distribuée de manière homogène sur $\mathbb{T}^3 := \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ le tore à 3 dimensions. $\mathfrak{A}_0$ est la σ-algèbre des sous-ensembles de Borel de $\Omega \cong \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$, avec Ω la cellule unité du réseau cubique $\mathbb{Z}^3$, et $\mathbb{P}_0$ la mesure de Lebesgue sur Ω. On notera $\tilde{\mathbb{E}}[\cdot\,] = \int_N \int_\Omega (\cdot\,)\mathrm{d}\mathbb{P}(\eta)\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$ l'espérance induite par la mesure de probabilité induite $\mathbb{P} \times \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$. Pour $(\eta, \boldsymbol{\theta}) \in \tilde{N}$, définissons le groupe des transformations :

$$\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta, \boldsymbol{\theta}) = \big(\tau_{\underline{\mathbf{v}+\boldsymbol{\theta}}}\eta, (\mathbf{v} \dot{+} \boldsymbol{\theta})\big) \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3 \tag{5.66}$$

où $\underline{\mathbf{x}}$ et $\dot{\mathbf{x}}$ désignent la décomposition (unique) d'un vecteur $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ comme somme d'un vecteur $\underline{\mathbf{x}} \in \mathbb{Z}^3$ et d'un vecteur $\dot{\mathbf{x}} \in \Omega$. Le groupe des transformations $\{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ est $\mathbb{R}^3$-ergodique dans $\tilde{N}$ puisque le groupe $\{\tau_{\mathbf{j}}\}_{\mathbf{j}\in\mathbb{Z}^3}$ est $\mathbb{Z}^3$-ergodique dans N, voir [84].

Soit $\tilde{V}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})}$ le potentiel type Anderson "modifié" dont les réalisations sont données par :

$$\tilde{V}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}) := V_\eta(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{i}}(\eta) u(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta}-\mathbf{i}) \quad \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3 \tag{5.67}$$

avec $\tilde{V}_{(\eta,\mathbf{0})}(\mathbf{x}) = V_\eta(\mathbf{x})$. Ainsi construit, $\tilde{V}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})}$ est un champ scalaire aléatoire $\mathbb{R}^3$-ergodique :

$$\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}) = V_{\tau_{\underline{\mathbf{v}+\boldsymbol{\theta}}}\eta}(\mathbf{x}-(\mathbf{v}\dot{+}\boldsymbol{\theta})) = \sum_{\mathbf{j}\in\mathbb{Z}^3} \lambda_{\mathbf{j}}(\eta) u(\mathbf{x}-\mathbf{j}-\mathbf{v}-\boldsymbol{\theta}) = \tilde{V}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}-\mathbf{v})$$

On termine ce paragraphe par quelques propriétés spectrales de l'Hamiltonien à une particule sur l'espace tout entier. Sous les hypothèses (**H2**) et (**H3"**), soient $H_\infty(\omega, V_\eta)$ et $H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})$ les opérateurs de Schrödinger aléatoires agissant dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ définis par :

$$\forall\, \omega\in\mathbb{R}^3, \quad H_\infty(\omega, V_\eta) := \frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2 + V_\eta, \quad H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}) := \frac{1}{2}(-i\nabla-\omega\mathbf{a})^2 + \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}$$

En vertu de la Remarque 5.39, pour tout $\omega\in\mathbb{R}$, l'opérateur $H_\infty(\omega, V_\eta)$ (resp. $H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})$) est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ $\forall\,\eta\in N$ (resp. $\forall\,(\eta,\boldsymbol{\theta})\in N\times\Omega$). Par commodité, on désignera par la suite la fermeture de ces opérateurs par le même symbole.

Pour déduire des propriétés sur $\sigma(H_\infty(\omega, V_\eta))$ et $\sigma(H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}))$, on utilise :

Proposition 5.43. *Pour tout $\omega\in\mathbb{R}$, $\{H_\infty(\omega, V_\eta)\}_{\eta\in N}$ est une famille ergodique d'opérateurs auto-adjoints. Même chose pour $\{H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})\}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})\in\tilde{N}}$.*

Preuve Proposition 5.43.
Soit $\omega\in\mathbb{R}$. Comme V_η est un champ aléatoire jointement mesurable et $H_\infty(\omega, V_\eta)$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, alors $\{H_\infty(\omega, V_\eta)\}_{\eta\in N}$ est une famille mesurable d'opérateurs auto-adjoints (voir Proposition 2 du paragraphe 4.2 dans [62]). Même chose pour la famille $\{H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})\}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})\in\tilde{N}}$ puisque $\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}$ est également jointement mesurable.
En considérant $\{T_{\mathbf{v},\omega}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{G}^3}$, avec $\mathbb{G}=\mathbb{Z}$ ou $\mathbb{R}$, la famille des translations magnétiques (du réseau $\mathbb{Z}^3$ lorsque $\mathbb{G}=\mathbb{Z}$ ou réélles lorsque $\mathbb{G}=\mathbb{R}$, voir Définition 5.14), on établit sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ les identités :

$$H_\infty(\omega, V_{\tau_{\mathbf{v}}\eta}) = T_{\mathbf{v},\omega} H_\infty(\omega, V_\eta) T_{-\mathbf{v},\omega} \quad \eta\in N,\ \mathbf{v}\in\mathbb{Z}^3 \tag{5.68}$$

$$H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}) = T_{\mathbf{v},\omega} H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}) T_{-\mathbf{v},\omega} \quad (\eta,\boldsymbol{\theta})\in\tilde{N},\ \mathbf{v}\in\mathbb{R}^3 \tag{5.69}$$

où $\{\tau_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{Z}^3}$ est le groupe des transformations ergodiques défini en (5.65) préservant la mesure sur $(N, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ et $\{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ le groupe des transformations ergodiques défini en (5.66) préservant la mesure sur $(\tilde{N}, \tilde{\mathfrak{A}}, \tilde{\mathbb{P}})$. $\{T_{\mathbf{v},\omega}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{G}^3}$ étant une famille d'opérateurs unitaires, on conclut de (5.68) que la famille mesurable d'opérateurs auto-adjoints $\{H_\infty(\omega, V_\eta)\}_{\eta\in N}$ est ergodique (voir par ex. [83]). Même chose pour $\{H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})\}_{(\eta,\boldsymbol{\theta})\in\tilde{N}}$.

■

Comme conséquence de la Proposition 5.43, le spectre $\sigma(H_\infty(\omega, V_\eta))$ est non-aléatoire $\mathbb{P}$-presque sûrement, i.e. il existe un ensemble $\Sigma\subset\mathbb{R}$ tel que $\mathbb{P}\big(\sigma(H_\infty(\omega, V_\eta)) = \Sigma\big) = 1$ (voir [63], [83]). Le spectre discret $\sigma_{\text{dis}}\big(H_\infty(\omega, V_\eta)\big)$ et le spectre essentiel $\sigma_{\text{ess}}\big(H_\infty(\omega, V_\eta)\big)$ sont également non-aléatoires. D'autre part, $\sigma_{\text{dis}}\big(H_\infty(\omega, V_\eta)\big) = \emptyset$ $\mathbb{P}$-presque sûrement.
Les propriétés de $\sigma(H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}))$ sont identiques à celles de de $\sigma(H_\infty(\omega, V_\eta))$. D'ailleurs ces opérateurs sont unitairement équivalents :

$$H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}) = T_{\boldsymbol{\theta},\omega} H_\infty(\omega, V_\eta) T_{-\boldsymbol{\theta},\omega} \quad \boldsymbol{\theta}\in\Omega \tag{5.70}$$

7.2 Résultats principaux

Sous les hypothèses (**H1'**), (**H2**) et (**H3"**), soit $H_L(\omega, V_\eta) := \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2 + V_\eta$ l'Hamiltonien à une particule avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$. Réécrivons les grandeurs grand-canonique à volume fini, caractéristiques de la réponse magnétique du gaz confiné, en faisant apparaître la dépendance en η (marqueur de la stochasticité).

Comme $\sigma(H_\infty(\omega, V_\eta))$ est non-aléatoire $\mathbb{P}$-presque sûrement, il existe un sous-ensemble $N_1 \in \mathfrak{A}$ de N de $\mathbb{P}$-mesure 1, i.e. $\mathbb{P}(N_1) = 1$, tel que $\forall\, \eta \in N_1$, $\inf \sigma(H_\infty(\omega, V)) = E_0(\omega)$ indépendant de η. Pour $\beta > 0$, $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $L \in [1, \infty)$, soient $P_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon)$, $\rho_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ et $\mathcal{X}_L^{n,(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ la pression, la densité et les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini définies respectivement par (voir Corollaire 4.3) :

$$P_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V_\eta, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \quad \forall\, \eta \in N_1$$

$$\rho_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{1}{L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon} R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V_\eta, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \quad \forall\, \eta \in N_1$$

$$\begin{aligned}\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_L^{n,(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) = n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \cdot \\ \cdot \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1, \dots, i_j) \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!} \cdot \\ \cdot R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1; \omega, V_\eta, \xi) T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega, V_\eta, \xi) \cdots T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}; \omega, V_\eta, \xi) \quad \forall\, \eta \in N_1\end{aligned}$$

Voici le résultat principal de cet appendice :

<u>Théorème</u> 5.44. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
Alors il existe un ensemble $N_0 \in \mathfrak{A}$ de $\mathbb{P}$-mesure 1, i.e. $\mathbb{P}(N_0) = 1$, tel que $\forall\, \eta \in N_0$:

$$\begin{aligned}P_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \lim_{L\to\infty} P_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \\ \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \mathbb{E}\big[R_\infty^{(1)}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} + \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)\big]\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}\end{aligned} \tag{5.71}$$

$$\begin{aligned}\rho_\infty(\beta, \omega, z, \epsilon) := \lim_{L\to\infty} \rho_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \\ \frac{i}{2\pi}\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z + \epsilon} \mathbb{E}\big[R_\infty^{(1)}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} + \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)\big]\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_\infty^{n}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^{n,(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) = n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) \cdot \\ \cdot \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1, \dots, i_j) \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!} \cdot \\ \cdot \mathbb{E}\big[R_\infty^{(1)}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1; \omega, V_\eta, \xi) T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; \omega, V_\eta, \xi) \cdots T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j, \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)\big]\end{aligned} \tag{5.72}$$

Remarque 5.45. Réécriture des limites en terme de trace.
La limite thermodynamique de la pression grand-canonique en (5.71) peut encore s'écrire :

$$\lim_{L\to\infty} P_L^{(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\mathbb{E}\big[R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)\big]\Big\} \quad \mathbb{P}\text{-p.s.}$$

Les limites thermodynamiques de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique grand-canonique (voir (5.72) avec $n=1$ et $n=2$ respectivement) peuvent encore s'écrire :

$$\lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^{1,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \\ \left(\frac{q}{c}\right)\frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\mathbb{E}\big[R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)T_{1,\infty}(\omega,V_\eta,\xi)\big]\Big\} \quad \mathbb{P}\text{-p.s.}$$

$$\lim_{L\to\infty} \mathcal{X}_L^{2,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) = 2\left(\frac{q}{c}\right)^2\frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot \\ \cdot\,\mathbb{E}\big[R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)T_{1,\infty}(\omega,V_\eta,\xi)T_{1,\infty}(\omega,V_\eta,\xi) - R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)T_{2,\infty}(\omega,V_\eta,\xi)\big]\Big\} \quad \mathbb{P}\text{-p.s.}$$

Remarque 5.46. Au vu des résultats du Théorème 5.44, les limites thermodynamiques pour le modèle d'Anderson ne diffèrent de celles obtenues pour un potentiel purement $\mathbb{Z}^3$-périodique que par la moyenne sur le "désordre" symbolisée par l'espérance $\mathbb{E}[\cdot\,]$.

Les preuves de ces résultats reposent essentiellement sur le théorème suivant :

Théorème 5.47. *Théorème d'ergodicité de Birkhoff-Khintchine (cf. Proposition 1.13, [84]) Soient $(E,\mathfrak{E},\mathbb{P})$ un espace probabilisé complet et $\mathbb{E}[\cdot\,] := \int_E(\cdot\,)\mathrm{d}\mathbb{P}(\varepsilon)$ l'espérance induite. Soit $\mathcal{G}^{(\cdot\,)}(\cdot\,) : E\times\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ un champ aléatoire $\mathbb{R}^3$-ergodique tel que $\mathbb{E}[|\mathcal{G}^{(\varepsilon)}(\mathbf{0})|] < +\infty$. Désignant par Λ un cube de volume V centré en l'origine, on a $\mathbb{P}$-presque sûrement :*

$$\lim_{V\to\infty} V^{-1}\int_\Lambda \mathrm{d}\mathbf{u}\,\mathcal{G}^{(\varepsilon)}(\mathbf{u}) = \mathbb{E}[\mathcal{G}^{(\varepsilon)}(\mathbf{0})]$$

Remarque 5.48. Le théorème de Birkhoff énoncé comme ci-dessus fournit seulement des convergences simples. Par conséquent, les résultats du Théorème 5.44 ne permettent pas d'identifier les limites thermodynamiques des susceptibilités généralisées avec les dérivées partielles (par rapport à ω) de la limite thermodynamique de la pression grand-canonique. Pour ce faire, il faudrait par exemple mettre en place une version "uniforme sur les compacts" du théorème d'ergodicité de Birkhoff. Ce problème ne sera pas abordé ici.

7.3 Preuve du Théorème 5.44

Dans tout ce qui suit, $N_1 \in \mathfrak{A}$ désignera le sous-ensemble de N de $\mathbb{P}$-mesure 1 tel que $\forall\,\eta\in N_1$, $\inf\sigma(H_\infty(\omega,V_\eta)) = E_0(\omega)$ indépendant de η.

Cas de la pression grand-canonique

On commence par ce premier résultat :

Proposition 5.49. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
*Sous l'hypothèse **(H3")**, introduisons pour tout $(\eta, \boldsymbol{\theta}) \in N_1 \times \Omega$ l'opérateur :*

$$\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta, \omega, z, \epsilon) := \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)$$

(i). $\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ est un opérateur intégral borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.
Son noyau $\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\cdot\,, \cdot\,; \beta, \omega, z, \epsilon) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est continu et sa partie diagonale vérifie :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) &= \frac{i}{2\pi}\bigg(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\bigg)\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\ &= -\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\end{aligned}$$

où $R_\infty^{(2)}(\cdot\,, \cdot\,; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ est le noyau intégral de $R_\infty^2(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)$ et $F_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ est une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ exponentiellement décroissante sur le contour Γ_K.
(ii). $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est un champ aléatoire (à valeurs complexes) $\mathbb{R}^3$-ergodique.
(iii). Il existe une constante $c = c(\beta, K) > 0$ telle que :

$$\tilde{\mathbb{E}}\big[|\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0}, \mathbf{0}; \beta, \omega, z, \epsilon)|\big] \leq c$$

Preuve Proposition 5.49.
(i). Puisque $\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}} \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, il suffit d'utiliser les résultats de (i) Proposition 5.15.
(ii). Soit $\{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ le groupe des transformations ergodiques défini en (5.66) préservant la mesure sur $(\tilde{N}, \tilde{\mathfrak{A}}, \tilde{\mathbb{P}})$ et $\{T_{\mathbf{v},\omega}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ les translations magnétiques réélles.
Comme conséquence de (5.69), $R_\infty(\omega, \tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}, \xi) = T_{\mathbf{v},\omega} R_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi) T_{-\mathbf{v},\omega}$. Par suite $\mathcal{I}_{\infty,0}^{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta, \omega, z, \epsilon) = T_{\mathbf{v},\omega} \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta, \omega, z, \epsilon) T_{-\mathbf{v},\omega}$. Alors au sens des noyaux (cf. page 128) :

$$\forall\, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathcal{I}_{\infty,0}^{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{v})} \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x} - \mathbf{v}, \mathbf{y} - \mathbf{v}; \beta, \omega, z, \epsilon) \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{v})}$$

En faisant $\mathbf{x} = \mathbf{y}$, on obtient : $\mathcal{I}_{\infty,0}^{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) = \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x} - \mathbf{v}, \mathbf{x} - \mathbf{v}; \beta, \omega, z, \epsilon)$.
De par la Définition 5.40, $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)$ est un champ aléatoire $\mathbb{R}^3$-ergodique.
(iii). D'abord $R_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi) = T_{\boldsymbol{\theta},\omega} R_\infty(\omega, V_\eta, \xi) T_{-\boldsymbol{\theta},\omega}$ puisque les opérateurs $H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})$ et $H_\infty(\omega, V_\eta)$ sont unitairement équivalents, voir (5.70). Ceci entraîne au sens des noyaux :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \quad R_\infty^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta})} R_\infty^{(2)}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} - \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi) \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\theta})}$$

$$\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon) = -\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(2)}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)$$

Puisque $H_\infty(\omega, V_\eta)$ est borné inférieurement uniformément en $\eta \in N$ et que $\|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}}$ est borné uniformément en $\eta \in N_1$, alors il existe un polynôme $p(\cdot\,)$ tel que pour tout $\xi \in \Gamma_K$ et uniformément en $(\eta, \boldsymbol{\theta}) \in N_1 \times \Omega$ et $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, $|R_\infty^{(2)}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)| \leq p(|\xi|)$.
Par décroissance exponentielle de $F_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur Γ_K, il existe $c = c(\beta, K) > 0$ telle que uniformément en $(\eta, \boldsymbol{\theta})$:

$$|\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta, \omega, z, \epsilon)| \leq \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, p(|\xi|) |F_\epsilon(\beta, z; \xi)| \leq c \tag{5.73}$$

A partir de (5.73), on déduit :

$$\tilde{\mathbb{E}}\big[|\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)|\big] = \mathbb{E}\bigg[\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}\,|\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)|\bigg] \leq c|\Omega|\int_N \mathrm{d}\mathbb{P}(\eta) = c$$

A noter que ces estimations permettent l'application du théorème de Tonelli :

$$\tilde{\mathbb{E}}\big[\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)\big] = -\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\, F_\epsilon(\beta,z;\xi)\tilde{\mathbb{E}}\big[R_\infty^{(2)}(-\boldsymbol{\theta},-\boldsymbol{\theta};\omega,V_\eta,\xi)\big]$$

■

Remarque 5.50. Soit $U \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert et χ_U sa fonction caractéristique associée. Par les mêmes arguments que ceux de la Remarque 5.16, on montre que $\chi_U\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est un opérateur à trace sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. Et par continutié du noyau $\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon)$:

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_U\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\beta,\omega,z,\epsilon)\big\} = \int_U \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$$

Lemme 5.51. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Alors pour tout $\eta \in N_1$:*

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L^3}\frac{1}{\beta}\bigg|\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\bigg\{\chi_{\Lambda_L}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\{R_L(\omega,V_\eta,\xi)-R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)\}\bigg\}\bigg| = 0$$

Preuve Lemme 5.51.
En vertu de la Remarque 5.50, la quantité $\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\{\chi_{\Lambda_L}\mathcal{I}_{\infty,0}^{(\eta,\mathbf{0})}(\beta,\omega,z,\epsilon)\}$ est bien définie. Soit $\kappa > 0$ un réél. On utilisera la décomposition du cube $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ suivante :

$$\Lambda_L = (\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \cup \Lambda_\kappa \quad \text{avec } \Lambda_\kappa := \{\mathbf{x} \in \Lambda_L \,:\, \mathrm{dist}(\mathbf{x},\partial\Lambda_L) < \kappa\} \tag{5.74}$$

$$\text{Pour } L \text{ suffisamment grand,} \quad |\Lambda_\kappa| = \mathcal{O}(L^2) \tag{5.75}$$

Avec $F_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ exponentiellement décroissante sur Γ_K, on a :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{L^3}\frac{1}{\beta}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\bigg\{\chi_{\Lambda_L}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\{R_L(\omega,V_\eta,\xi)-R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)\}\bigg\}\\
&= \frac{1}{\beta}\frac{1}{L^3}\frac{i}{2\pi}\bigg\{\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V_\eta,\xi)-R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V_\eta,\xi)\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}+\\
&\qquad+\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\{R_\infty^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,V_\eta,\xi)-R_L^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,V_\eta,\xi)\}\bigg\}\quad\forall\,\eta\in N_1
\end{aligned}$$

car $(\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa) \ni \mathbf{x} \mapsto \{R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V_\eta,\xi)-R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V_\eta,\xi)\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ est continue (cf. (i) Proposition 3.4 compte-tenu de la définition de Λ_κ) ainsi que $\Lambda_L \ni \mathbf{x} \mapsto R_L^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,V_\eta,\xi)$. En utilisant les mêmes arguments que ceux de la preuve du Théorème 5.1 pour le cas de la pression (voir page 133), on montre que le module de chacune des intégrales à l'intérieur des accolades se comporte comme un $\mathcal{O}(L^2)$ pour L suffisamment grand en vertu de (5.75).

■

Remarque 5.52. En choisissant une décomposition de Λ_L du type (5.74), on prend implicitement la limite $\Lambda_L \to \infty$ au sens de Van Hove, voir [95]. Il existe un autre moyen de prendre cette limite, appelé limite au sens de Fisher, dont on rappelle la définition.
Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert borné simplement connexe à bords lisses $\partial\Lambda$. Pour tout réél $p > 0$, soient $\Lambda_p := \{\mathbf{x} \in \Lambda \,:\, \mathrm{dist}(\mathbf{x}, \partial\Lambda) \leq p\}$ et $\mathrm{diam}(\Lambda)$ le diamètre de Λ. Alors $\Lambda \to \infty$ au sens de Fisher s'il existe une fonction $\pi(\cdot)$ telle que $\lim_{\alpha\to 0} \pi(\alpha) = 0$ et :

$$\frac{|\Lambda_{\alpha \mathrm{diam}(\Lambda)}|}{|\Lambda|} \leq \pi(\alpha) \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ suffisamment petit}$$

Cette définition de convergence est moins générale que celle de Van Hove ([84], page 105).

Preuve Théorème 5.44 : cas de la pression grand-canonique.
Pour les besoins de la preuve, posons $\Lambda_L(\mathbf{0}) = \Lambda_L$. Cette notation signifie que le cube $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$ est centré en l'origine des coordonnées. On a :

$$P_L^{(\eta)}(\beta, \omega, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, V_\eta, \xi)\Big\} +$$
$$+\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)\{R_L(\omega, V_\eta, \xi) - R_\infty(\omega, V_\eta, \xi)\}\Big\} \quad \forall\, \eta \in N_1$$

En vertu du Lemme 5.51, le second terme donne une contribution nulle à la limite $L \to \infty$. Soit $\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})$ le cube centré en $\boldsymbol{\theta}$. En utilisant que les opérateurs $H_\infty(\omega, V_\eta)$ et $H_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}})$ sont unitairement équivalents, voir (5.70) :

$$\begin{aligned}
&\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, V_\eta, \xi)\Big\} \\
&\qquad = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{T_{-\boldsymbol{\theta},\omega} T_{\boldsymbol{\theta},\omega}\chi_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, V_\eta, \xi)\Big\} \\
&\qquad = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_{\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\Big\}
\end{aligned}$$

où on a utilisé la cyclicité de la trace dans la dernière ligne. En décomposant l'intégrale $\int_{-\frac{L}{2}+\theta_j}^{\frac{L}{2}+\theta_j} \mathrm{d}\theta_j$ comme $\Big(\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} - \int_{-\frac{L}{2}}^{-\frac{L}{2}+\theta_j} + \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+\theta_j}\Big)\mathrm{d}\theta_j$, $j \in \{1, 2, 3\}$, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\int_{\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})} \mathrm{d}\mathbf{x}\Big(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\Big)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\
&\quad = \frac{1}{|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})} \mathrm{d}\mathbf{x}\Big(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\Big)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} + \text{"autres termes"}
\end{aligned} \tag{5.76}$$

où les "autres termes" (au nombre de 26) ont une contribution nulle à la limite $L \to \infty$. En effet prenons des termes génériques, par exemple :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{L^3}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_i \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+\theta_j} \mathrm{d}x_j \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_k \Big(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\Big)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}, \\
&\qquad \frac{-1}{L^3}\int_{-\frac{L}{2}}^{-\frac{L}{2}+\theta_i} \mathrm{d}x_i \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_j \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+\theta_k} \mathrm{d}x_k \Big(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi)\Big)\Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}
\end{aligned}$$

Comme l'intégrande entre parenthèses est uniformément borné en $\mathbf{x}$ par une constante $c(\beta, K) > 0$ (cf. estimation (5.73)), le module de tous les "autres termes" se comporte alors comme $\mathcal{O}(L^{-1})$ lorsque $L \to \infty$. Il reste à appliquer le Théorème de Birkhoff-Khintchine, justifié par (ii) et (iii) Proposition 5.49, au premier terme du membre de droite de (5.76) :

$$\begin{aligned}
\lim_{L\to\infty} \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} \\
= \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\tilde{\mathbb{E}}\left[\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) R_\infty^{(1)}(-\boldsymbol{\theta},\mathbf{y}-\boldsymbol{\theta};\omega,V_\eta,\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}\right] \quad \tilde{\mathbb{P}}\text{-p.s.} \\
= \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\mathbb{E}\big[R_\infty^{(1)}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{y}+\boldsymbol{\theta};\omega,V_\eta,\xi)\big]\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}} \quad \tilde{\mathbb{P}}\text{-p.s.}
\end{aligned}$$

Il reste à vérifier que la limite ci-dessus existe pour $\mathbb{P}$-presque tout $\eta \in N$ et pour tout $\boldsymbol{\theta} \in \Omega$ et qu'elle s'identifie à l'expression (5.71).

■

Cas des susceptibilités généralisées grand-canonique

Proposition 5.53. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un compact tel que $z \in K$. Soit Γ_K un contour orienté positivement du type* (2.14) *inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) := \ln(1+\epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir* (2.13).
*Sous l'hypothèse **(H3")**, introduisons pour tout $(\eta,\boldsymbol{\theta}) \in N_1 \times \Omega$ la fonction définie $\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ par :*

$$\begin{aligned}
\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) := n!\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^k\cdot \\
\cdot \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\big)^{n-k}}{(n-k)!} R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\cdot \\
\cdot T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)
\end{aligned}$$

(i). *Il existe une constante $c_n = c(\beta,K,|\omega|,n) > 0$ telle que :*

$$\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad |\mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)| \le c_n$$

(ii). *$\mathbf{x} \mapsto \mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$ est un champ aléatoire (à valeurs complexes) $\mathbb{R}^3$-ergodique.*
(iii). *Il existe une autre constante $c_n = c(\beta,K,|\omega|,n) > 0$ telle que :*

$$\tilde{\mathbb{E}}\big[|\mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)|\big] \le c_n \tag{5.77}$$

Preuve Proposition 5.53.
(i). Puisque $\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}} \in L^{3+\epsilon_0}_{\mathrm{uloc}}(\mathbb{R}^3)$, il suffit d'utiliser les résultats de (i) Proposition 5.26.
(ii). Soit $\{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ le groupe des transformations ergodiques défini en (5.66) préservant la mesure sur $(\tilde{N},\tilde{\mathfrak{A}},\tilde{\mathbb{P}})$ et $\{T_{\mathbf{v},\omega}\}_{\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3}$ les translations magnétiques réélles.
Avec la convention $0^0 = 1$, pour tout entier $j \ge 1$, $m \in \mathbb{N}$ et $L \in [1,\infty]$; posons :

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_L^{j,m}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi) := \frac{\big(i\,\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\big)^m}{m!} R_L^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\cdot \\
\cdot T_{i_1,L}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\cdots T_{i_{j-1},L}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)T_{i_j,L}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)
\end{aligned} \tag{5.78}$$

D'abord en utilisant que $\phi(\mathbf{u},\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{e}_3}{2}\cdot(\mathbf{w}\wedge\mathbf{u})$, on a pour tout $\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j)\\
&= \phi(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{z}_1-\mathbf{v}) + \phi(\mathbf{z}_1-\mathbf{v},\mathbf{z}_2-\mathbf{v}) + \cdots + \phi(\mathbf{z}_{j-1}-\mathbf{v},\mathbf{z}_j-\mathbf{v}) + \phi(\mathbf{z}_j-\mathbf{v},\mathbf{x}-\mathbf{v})\\
&= \mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{z}_1-\mathbf{v},\dots,\mathbf{z}_j-\mathbf{v})
\end{aligned}$$

Ensuite, comme conséquence de (5.69), $R_\infty(\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi) = T_{\mathbf{v},\omega}R_\infty(\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)T_{-\mathbf{v},\omega}$. Ceci se traduit au sens des noyaux par :

$$R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{v})}R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{y}-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{v})} \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Cette identité assure d'autre part que $T_{i_l,\infty}(\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi) = T_{\mathbf{v},\omega}T_{i_l,\infty}(\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)T_{-\mathbf{v},\omega}$ pour $i_l\in\{1,2\}$ (voir méthode paragraphe 2.2). Au sens des noyaux, on a également :

$$T_{i_l,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi) = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{v})}T_{i_l,\infty}(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{y}-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{v})} \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Par l'intermédiaire de ces identités, il vient :

$$\begin{aligned}
&R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi)T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi)\cdots T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{x};\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi)\\
&\qquad = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{v})}R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{z}_1-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{z}_1,\mathbf{v})}.\\
&\qquad\cdot\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{z}_1,\mathbf{v})}T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1-\mathbf{v},\mathbf{z}_2-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{z}_2,\mathbf{v})}\cdots\\
&\qquad\qquad\cdots\cdot\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{z}_j,\mathbf{v})}T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j-\mathbf{v},\mathbf{x}-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{v})}
\end{aligned}$$

Au final, en réunissant tous ces résultats :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}^{j,n-k}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j;\omega,\tilde{V}_{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})},\xi) &=\\
&= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}^{j,n-k}_\infty(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{z}_1-\mathbf{v},\dots,\mathbf{z}_j-\mathbf{v};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)\\
&= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_j\,\mathcal{K}^{j,n-k}_\infty(\mathbf{x}-\mathbf{v},\mathbf{Z}_1,\dots,\mathbf{Z}_j;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)
\end{aligned}$$

ce qui permet d'obtenir que pour tout $\mathbf{v}\in\mathbb{R}^3$, $\mathcal{I}^{\tilde{\tau}_{\mathbf{v}}(\eta,\boldsymbol{\theta})}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) = \mathcal{I}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}_{\infty,n}(\mathbf{x}-\mathbf{v};\beta,\omega,z,\epsilon)$.
(iii). En réutilisant les arguments de la preuve de (ii), on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon) &= n!\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^k\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi^k_j(i_1,\dots,i_j)\cdot\\
&\cdot\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{Z}_j\,\mathcal{K}^{j,n-k}_\infty(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta},\mathbf{Z}_1,\dots,\mathbf{Z}_j;\omega,V_\eta,\xi) = \mathcal{I}^{(\eta,\mathbf{0})}_{\infty,n}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta};\beta,\omega,z,\epsilon) \quad (5.79)
\end{aligned}$$

En effet, d'une part pour tout $\boldsymbol{\theta}\in\Omega$, $\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j) = \mathrm{Fl}_j(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1-\boldsymbol{\theta},\dots,\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\theta})$. D'autre part, le fait que $R_\infty(\omega,\tilde{V}_{\eta,\theta},\xi) = T_{\boldsymbol{\theta},\omega}R_\infty(\omega,V_\eta,\xi)T_{-\boldsymbol{\theta},\omega}$ et que $T_{i_l,\infty}(\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi) = T_{\boldsymbol{\theta},\omega}T_{i_l,\infty}(\omega,V_\eta,\xi)T_{-\boldsymbol{\theta},\omega}$ pour $i_l\in\{1,2\}$; entraînent respectivement au sens des noyaux :

$$\begin{aligned}
R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi) &= \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta})}R^{(1)}_\infty(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta},\mathbf{y}-\boldsymbol{\theta};\omega,V_\eta,\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\theta})} \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}\\
T_{i_l,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi) &= \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta})}T_{i_l,\infty}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta},\mathbf{y}-\boldsymbol{\theta};\omega,V_\eta,\xi)\mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\theta})} \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}
\end{aligned}$$

Ces résultats permettent alors d'obtenir :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j; \omega, \tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}}, \xi) = \\ = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \, \mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\theta}, \ldots, \mathbf{z}_j - \boldsymbol{\theta}; \omega, V_\eta, \xi)$$

Passons aux estimations. Rappelons que sous l'hypothèse (**H3"**), $H_\infty(\omega, V_\eta)$ est borné inférieurement uniformément en $\eta \in N$ et que $\|V\|_{3+\epsilon_0,\mathrm{uloc}}$ est borné uniformément en $\eta \in N$. En réutilisant les arguments menant à l'estimation commune (5.35), il existe un polynôme $p(\cdot)$ et un réél $\delta > 0$ assez petit tel que uniformément en $\eta \in N_1$:

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\Lambda_L \times \Lambda_L) \setminus D_L,\ \forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \max\left\{|R_L^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V_\eta, \xi)|, |T_{j,L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega, V_\eta, \xi)|\right\} \\ \leq p(|\xi|)(1 + |\omega|)^3 \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad j \in \{1, 2\},\ L \in [1, \infty] \quad (5.80)$$

A partir de (5.80), on déduit l'existence d'un polynôme $p_{j+1}(\cdot)$ et d'un réél $\delta > 0$ assez petit tel que uniformément en $\eta \in N_1$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j; \omega, V_\eta, \xi)| \leq p_{j+1}(|\xi|)(1 + |\omega|)^{3j+3}. \\ \cdot \frac{|i\mathrm{Fl}_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta} - \mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}+\boldsymbol{\theta}|}}{|\mathbf{z}_j - \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}|}$$

Cette estimation étant du même type que (5.46), on peut répéter les arguments menant à l'estimation (5.47) : il existe une constante $c > 0$ telle que uniformément en $\eta \in N_1$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad |\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j; \omega, V_\eta, \xi)| \leq c^{2(n-k)} \frac{\left(j^2(n-k)^2\right)^{n-k}}{(n-k)!} \cdot \\ \cdot (1+|\xi|)^{2(n-k)} p_{j+1}(|\xi|)(1+|\omega|)^{3j+3} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta} - \mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{2(1+|\xi|)}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}+\boldsymbol{\theta}|}}{|\mathbf{z}_j - \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}|}$$

Le reste de la preuve est basé sur le fait qu'il existe un autre polynôme $p_j(\cdot)$ tel que uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{\theta} \in \Omega$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{x}-\boldsymbol{\theta}-\mathbf{z}_1|}}{|\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta} - \mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\mathbf{x}+\boldsymbol{\theta}|}}{|\mathbf{z}_j - \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}|} \leq p_j(|\xi|)$$

Ainsi en réunissant ces résultats, il existe un autre polynôme $p_n(\cdot)$ et une autre constante $c > 1$ tels que uniformément en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ et $(\eta, \boldsymbol{\theta}) \in N_1 \times \Omega$:

$$\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1, \ldots, i_j) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j \cdot |\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_j; \omega, V_\eta, \xi)| \\ \leq c^n \left(\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \frac{\left(j^2(n-k)^2\right)^{n-k}}{(n-k)!} \right) (1 + |\omega|)^{3n+3} p_n(|\xi|) \quad (5.81)$$

Puis en utilisant la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot\,)$ sur le contour Γ_K :

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbb{E}}\big[|\mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)|\big] \\
&\leq \frac{n!}{2\pi} c^n \bigg(\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!} \bigg) (1+|\omega|)^{3n+3} \mathbb{E}\bigg[\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, p_n(|\xi|) |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)| \bigg] \\
&\leq n! c^n(\beta,K) \bigg(\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \frac{\big(j^2(n-k)^2\big)^{n-k}}{(n-k)!} \bigg) (1+|\omega|)^{3n+3} |\Omega| \int_N \mathrm{d}\mathbb{P}(\eta)
\end{aligned}$$

L'estimation ci-dessus permet d'obtenir (5.77). Montrons pour finir que l'on peut réécrire :

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbb{E}}\big[\mathcal{I}_{\infty,n}^{(\eta,\boldsymbol{\theta})}(\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)\big] = n! \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi) \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} (-1)^k \cdot \\
&\cdot \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j) \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathbb{E}\big[\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,V_\eta,\xi)\big] \qquad (5.82)
\end{aligned}$$

Vu comme une conséquence du théorème de Tonelli, il suffit de montrer qu'il existe une constante $c_n = c(|\omega|, n) > 0$ et un polynôme $p_n(\cdot\,)$ tels que :

$$\begin{aligned}
\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad &\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \sum_{i_l \in \{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\ldots,i_j) \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \cdots \\
&\cdots \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}_j\, \mathbb{E}\big[|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,V_\eta,\xi)|\big] \leq c_n p_n(|\xi|) \qquad (5.83)
\end{aligned}$$

Soient $p_0, \ldots, p_j \geq 1$ des entiers tels que $\sum_{l=0}^{j} \frac{1}{p_l} = 1$. Par l'inégalité de Hölder généralisée :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\big[|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,V_\eta,\xi)|\big] \leq \frac{|i\mathrm{Fl}_j(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!} \cdot \\
&\cdot \big\{\mathbb{E}\big[|R_\infty^{(1)}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1;\omega,V_\eta,\xi)|^{p_0}\big]\big\}^{\frac{1}{p_0}} \prod_{l=1}^{j} \big\{\mathbb{E}\big[|T_{i_l,\infty}(\mathbf{z}_l,\mathbf{z}_{l+1};\omega,V_\eta,\xi)|^{p_l}\big]\big\}^{\frac{1}{p_l}} \quad \mathbf{z}_{j+1} := \boldsymbol{\theta}
\end{aligned}$$

A partir de l'estimation (5.80) uniforme en $\eta \in N_1$, on déduit l'existence d'un polynôme $p_{j+1}(\cdot\,)$ et d'un réél $\delta > 0$ assez petit tel que :

$$\begin{aligned}
&\forall\, \xi \in \Gamma_K, \quad \mathbb{E}\big[|\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j;\omega,V_\eta,\xi)|\big] \leq p_{j+1}(|\xi|)(1+|\omega|)^{3j+3} \cdot \\
&\cdot \frac{|i\mathrm{Fl}_j(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z}_1,\ldots,\mathbf{z}_j)|^{n-k}}{(n-k)!} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\boldsymbol{\theta}-\mathbf{z}_1|}}{|\boldsymbol{\theta}-\mathbf{z}_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|}}{|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|} \cdots \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\delta}{1+|\xi|}|\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\theta}|}}{|\mathbf{z}_j-\boldsymbol{\theta}|} \prod_{l=0}^{j} \bigg(\int_N \mathrm{d}\mathbb{P}(\eta) \bigg)^{\frac{1}{p_l}}
\end{aligned}$$

Il suffit de répéter les mêmes arguments que ceux menant à (5.81) pour obtenir (5.83).

■

Lemme 5.54. *Soient $\beta > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0(\omega))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Alors pour tout $\eta \in N_1$:*

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{\beta L^3}\Bigg|\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\cdot$$
$$\cdot\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\left\{\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_L^{j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V_\eta,\xi)-\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{z};\omega,V_\eta,\xi)\right\}\Bigg| = 0$$

Preuve Lemme 5.54.
Avec $L \in [1,\infty]$, soit $\mathcal{K}_L^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,m} = \mathcal{K}_L^{j,m}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j;\omega,\tilde{V}_{\eta,\boldsymbol{\theta}},\xi)$ la quantité définie en (5.78).
Pour $\kappa > 0$, soit $(\Lambda_L \setminus \Lambda_\kappa)\cup\Lambda_\kappa$ la décomposition du cube Λ_L, voir (5.74).
Pour tout $L \in [1,\infty)$, $\eta \in N_1$ et $n \geq 1$ entier, posons :

$$\hat{u}_L^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_L^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}$$

$$\hat{v}_L^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_L^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}$$

$$\hat{u}_\infty^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}$$

$$\hat{w}_\infty^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\Bigg[\int_{\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\cdot$$
$$\cdot\Bigg\{\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_2\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}+\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_{j-1}\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}+$$
$$+\sum_{l'=2}^{j-1}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{z}_{l'}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_{l'+1}\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}\Bigg\}+\int_{\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}\Bigg]$$

Avec ces notations, il vient :

$$\Bigg|\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\cdot$$
$$\cdot\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\left\{\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_L^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}-\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}\right\}\Bigg|$$
$$\leq \sup_{z\in K}|\hat{u}_L^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon)-\hat{u}_\infty^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon)|+\sup_{z\in K}|\hat{v}_\infty^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon)|+\sup_{z\in K}|\hat{w}_\infty^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon)|$$

En répétant les mêmes arguments que ceux utilisés dans chacune des preuves des Lemmes 5.28 et 5.29, on montre que chacun des termes du membre de droite se comporte comme un $\mathcal{O}(L^2)$ pour L suffisamment grand en vertu de (5.75).

■

Preuve Théorème 5.44 : cas des susceptibilités généralisées grand-canonique. Posons $\Lambda_L(\mathbf{0}) = \Lambda_L$. En reprenant les notations de la preuve précédente :

$$\frac{1}{n!}\left(\frac{c}{q}\right)^n \mathcal{X}_L^{n,(\eta)}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\cdot$$
$$\cdot\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\mathrm{d}\mathbf{x}\left\{\int_{\Lambda_L^j}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_L^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k} - \int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}\right\}+$$
$$+\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}$$

En vertu du Lemme 5.54, le premier terme donne une contribution nulle à la limite $L\to\infty$. Soit $\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})$ le cube centré en $\boldsymbol{\theta}$. En vertu de l'identité (5.79), on a :

$$\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\mathbf{0}),j,n-k}$$
$$=\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,n-k}$$

En décomposant l'intégrale $\int_{-\frac{L}{2}+\theta_j}^{\frac{L}{2}+\theta_j}\mathrm{d}\theta_j$ comme $\left(\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} - \int_{-\frac{L}{2}}^{-\frac{L}{2}+\theta_j} + \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+\theta_j}\right)\mathrm{d}\theta_j$, $j\in\{1,2,3\}$, on peut écrire :

$$\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L(\boldsymbol{\theta})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,n-k}$$
$$=\frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,n-k}+$$
$$+\text{"autres termes"} \qquad (5.84)$$

où les "autres termes" (au nombre de 26) ont une contribution nulle à la limite $L\to\infty$. En effet prenons un terme générique, par exemple :

$$\frac{1}{L^3}\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\cdot$$
$$\cdot\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\mathrm{d}x_i\int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+\theta_j}\mathrm{d}x_j\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\mathrm{d}x_k\left(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\sum_{i_l\in\{1,2\}^j}\chi_j^k\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,n-k}\right)$$

Comme l'intégrande entre parenthèses est uniformément borné en $\mathbf{x}$ par $c(|\omega|)^n p_n(|\xi|)$, avec $c(|\omega|)>1$ (cf. estimation (5.81)) assurant ainsi l'absolue convergence de l'intégrale par rapport à la variable ξ, le module de tous les "autres termes" se comporte donc comme $\mathcal{O}(L^{-1})$ lorsque $L\to\infty$. Il reste à appliquer le Théorème de Birkhoff-Khintchine, justifié

par (ii) et (iii) Proposition 5.53, au premier terme du membre de droite de (5.84) :

$$\lim_{L\to\infty} \frac{\epsilon}{\beta|\Lambda_L(\mathbf{0})|}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Lambda_L(\mathbf{0})}\mathrm{d}\mathbf{x}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathcal{K}_\infty^{(\eta,\boldsymbol{\theta}),j,n-k}(\mathbf{x},\mathbf{z})$$

$$= \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k \int_{\Omega}\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}\int_{\mathbb{R}^{3j}}\mathrm{d}\mathbf{z}\,\mathbb{E}\big[\mathcal{K}_\infty^{(\eta),j,n-k}(\boldsymbol{\theta},\mathbf{z})\big] \quad \tilde{\mathbb{P}}\text{-p.s.}$$

où on a utilisé notamment (5.82) dans le membre de droite.
Il reste à vérifier que la limite ci-dessus existe pour $\mathbb{P}$-presque tout $\eta \in N$ et pour tout $\boldsymbol{\theta} \in \Omega$ et qu'elle s'identifie à l'expression (5.72).

■

8 Appendice 3 : limites thermodynamiques pour le cas $V = 0$

Dans cet appendice, on s'intéresse aux limites thermodynamiques des grandeurs grand-canonique dans le cas particulier où $V = 0$. On donne notamment des formules explicites en terme des fonctions de Bose et de Fermi des limites thermodynamiques de la pression, densité et susceptibilité grand-canonique lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle.

8.1 Limites thermodynamiques

Résultats principaux

Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Lorsque $V = 0$, $E_0^{(0)}(\omega) := \inf \sigma(H_\infty(\omega, 0)) = |\omega|/2$ (voir [6]). Les domaines de définition de la fugacité (2.1) et (2.2) deviennent :

$$\mathcal{D}_{-1}(E_0^{(0)}(\omega)) := \mathbb{C}\setminus[\mathrm{e}^{\beta|\omega|/2},+\infty), \quad \mathcal{D}_{+1}(E_0^{(0)}(\omega)) := \mathbb{C}\setminus(-\infty,-\mathrm{e}^{\beta|\omega|/2}]$$
$$\mathcal{D}_{-1} := \mathbb{C}\setminus[1,+\infty), \quad \mathcal{D}_{+1} := \mathbb{C}\setminus(-\infty,-1]$$

Soient $z \in \mathcal{D}_\epsilon(E_0^{(0)}(\omega))$ et $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0^{(0)}(\omega))$ un sous-ensemble compact tel que $z \in K$. Γ_K désignera un contour orienté positivement du type (2.14) inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) := \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})$, voir (2.13).

Soit $P_L^{(0)}(\beta, \omega, z, \epsilon)$ la pression grand-canonique à volume fini définie en (4.17) avec $V = 0$. Introduisons son candidat à la limite thermodynamique (cf. justification paragraphe suivant) :

$$P_\infty^{(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\bigg(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)R_\infty^{(1)}(\mathbf{0},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\bigg)\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}} \tag{5.85}$$

On établit un premier résultat de convergence uniforme :

<u>Théorème</u> 5.55. *Soient $\beta > 0$ et $\omega \in \mathbb{R}$. Alors pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(E_0^{(0)}(\omega))$:*

$$\lim_{L\to\infty}\sup_{z\in K}|P_L^{(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon) - P_\infty^{(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0$$

où la limite est prise soit au sens de Van Hove, soit au sens de Fisher.

Soient $\mathcal{X}_L^{n,(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon)$, $n \in \mathbb{N}^*$, les susceptibilités généralisées grand-canonique à volume fini définies en (4.19) avec $V = 0$. Introduisons leur candidat à la limite thermodynamique :

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \mathcal{X}_\infty^{n,(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := n!\left(\frac{q}{c}\right)^n \frac{i}{2\pi}\frac{\epsilon}{\beta}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(-1)^j\cdot$$

$$\cdot \sum_{i_l\in\{1,2\}^j} \chi_j^k(i_1,\dots,i_j)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\cdots\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_j \frac{\big(i(\mathrm{Fl}_j(\mathbf{0},\mathbf{z}_1,\dots,\mathbf{z}_j))\big)^{n-k}}{(n-k)!} R_\infty^{(1)}(\mathbf{0},\mathbf{z}_1;\omega,V=0,\xi)\cdot$$

$$\cdot\, T_{i_1,\infty}(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2;\omega,V=0,\xi)\cdots T_{i_{j-1},\infty}(\mathbf{z}_{j-1},\mathbf{z}_j;\omega,V=0,\xi)T_{i_j,\infty}(\mathbf{z}_j,\mathbf{0};\omega,V=0,\xi) \quad (5.86)$$

avec la convention $0^0 = 1$; pour tout $j \in \mathbb{N}^*$, Fl_j est défini en (4.11) et pour tout entier $k \geq j \geq 1$, $\chi_j^k(i_1,\dots,i_j)$ est la fonction caractéristique définie en (4.3).

Voici un second résultat de convergence uniforme (ici énoncé dans sa version globale) :

Théorème 5.56. *Soit $\beta > 0$. Alors pour tout compact $[\omega_1,\omega_2] \subset \mathbb{R}$, $-\infty < \omega_1 < \omega_2 < +\infty$, et pour tout compact $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$:*

$$\forall\, n \in \mathbb{N}^*, \quad \lim_{L\to\infty}\sup_{\omega\in[\omega_1,\omega_2]}\sup_{z\in K}|\mathcal{X}_L^{n,(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon) - \mathcal{X}_\infty^{n,(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon)| = 0$$

où la limite est prise soit au sens de Van Hove, soit au sens de Fisher.

Remarque 5.57. Les résultats du Corollaire 5.2 restent valables. En particulier, la densité grand-canonique à volume fini en (4.18) (avec $V = 0$) admet pour limite thermodynamique :

$$\rho_\infty^{(0)}(\beta,\omega,z,\epsilon) := \beta z\frac{\partial P_\infty^{(0)}}{\partial z}(\beta,\omega,z,\epsilon) = \frac{i}{2\pi}\left(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi}/z+\epsilon}R_\infty^{(1)}(\mathbf{0},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}$$

Remarque 5.58. Les résultats des Corollaires 5.4 et 5.5 restent valables et assurent l'identification des quantités définies en (5.86) avec les dérivées partielles par rapport à ω de (5.85). Le Théorème 5.6 et le Corollaire 5.7 restent également valables.

Construction des candidats pour la limite thermodynamique

Dans ce paragraphe, on justifie la définition du candidat à la limite thermodynamique pour la pression grand-canonique en (5.85) et on démontre le Théorème 5.55. Puisque les méthodes mises en œuvre sont très proches du cas V périodique, on donnera seulement les principaux arguments menant à la construction des candidats pour les susceptibilités.

L'ingrédient principal intervenant dans la construction des candidats à la limite thermodynamique est le fait que l'Hamiltonien purement magnétique $H_\infty(\omega,0) := \frac{1}{2}(-i\nabla - \omega\mathbf{a})^2$ commute avec les translations magnétiques réélles $\{T_{\mathbf{x}_0,\omega}\}_{\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3}$, voir Définition 5.14.
En effet, en utilisant que $\nabla_{\mathbf{x}}\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0) = \mathbf{a}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{a}(\mathbf{x}) - \mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)$, il vient sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)} = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)) \quad \omega\in\mathbb{R},\ \mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3$$

assurant ainsi que $[H_\infty(\omega,0),T_{\mathbf{x}_0,\omega}] = 0$. Par conséquent $[R_\infty(\omega,V=0,\xi),T_{\mathbf{x}_0,\omega}] = 0$, ce qui entraîne au sens des noyaux (voir méthode page 128) : pour presque tout $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3$,

$$\forall\,\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3, \quad R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}+\mathbf{x}_0,\mathbf{y}+\mathbf{x}_0;\omega,V=0,\xi)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{x}_0)} = \mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)}R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi) \quad (5.87)$$

Soit $\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ l'opérateur défini en (5.20) avec $V=0$. Puisque $V\in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, l'assertion (i) de la Proposition 5.15 garantit que $\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$ est un opérateur intégral de noyau $\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\cdot\,,\cdot\,;\beta,\omega,z,\epsilon):\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ continu, voir (5.21) pour sa définition. En utilisant que $T_{-\mathbf{x}_0,\omega}\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)T_{\mathbf{x}_0,\omega}=\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\beta,\omega,z,\epsilon)$, on a alors au sens des noyaux :

$$\forall\,\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3,\ \ \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)}\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x}+\mathbf{x}_0,\mathbf{y}+\mathbf{x}_0;\beta,\omega,z,\epsilon)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{x}_0)}=\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{y};\beta,\omega,z,\epsilon)\ \ \mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3$$

puis par continuité de la partie diagonale $\mathbf{x}\mapsto\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$, on déduit :

$$\forall\,\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3,\quad \mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x}+\mathbf{x}_0,\mathbf{x}+\mathbf{x}_0;\beta,\omega,z,\epsilon)=\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)=\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)$$

ce qui assure que le candidat en (5.85) est bien défini : $P^{(0)}_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)=\frac{\epsilon}{\beta}\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)$.

Prouvons maintenant le Théorème 5.55 ; la limite sera prise au sens de Van Hove (cf. Remarque 5.52). Partant de l'identité :

$$P^{(0)}_L(\beta,\omega,z,\epsilon)=P^{(0)}_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)+P^{(0)}_L(\beta,\omega,z,\epsilon)-P^{(0)}_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)$$

et utilisant que $\frac{1}{|\Lambda_L|}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)=\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,0}(\mathbf{0},\mathbf{0};\beta,\omega,z,\epsilon)$, on a :

$$P^{(0)}_L(\beta,\omega,z,\epsilon)=\frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\bigg(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)R^{(1)}_\infty(\mathbf{0},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\bigg)\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}+$$
$$+\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\int_{\Lambda_L}\mathrm{d}\mathbf{x}\bigg(\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\}\bigg)\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$$

Soit $\kappa>0$ un réél. Considérons la décomposition du cube Λ_L comme en (5.74).
Avec $F_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ une primitive de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\cdot\,)$ exponentiellement décroissante sur Γ_K, on a :

$$P^{(0)}_L(\beta,\omega,z,\epsilon)-P^{(0)}_\infty(\beta,\omega,z,\epsilon)=$$
$$\frac{\epsilon}{\beta L^3}\frac{i}{2\pi}\bigg\{\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\,\{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\}|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}+$$
$$+\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)\int_{\Lambda_\kappa}\mathrm{d}\mathbf{x}\,R^{(2)}_L(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,0,\xi)-|\Lambda_\kappa|\int_{\Gamma_K}\mathrm{d}\xi\,F_\epsilon(\beta,z;\xi)R^{(2)}_\infty(\mathbf{0},\mathbf{0};\omega,0,\xi)\bigg\}$$

car $(\Lambda_L\setminus\Lambda_\kappa)\ni\mathbf{x}\mapsto\{R^{(1)}_L(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)-R^{(1)}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)\}\big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}}$ est continue (cf. (i) Proposition 3.4 vu la définition de Λ_κ) ainsi que $\Lambda_L\ni\mathbf{x}\mapsto R^{(2)}_L(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega,V=0,\xi)$.
En utilisant les mêmes arguments que ceux de la preuve du Théorème 5.1 pour le cas de la pression (voir page 133), on montre que le module de chacune des intégrales à l'intérieur des accolades se comporte comme un $\mathcal{O}(L^2)$ pour L suffisamment grand en vertu de (5.75).

Justifions la définition des quantités en (5.86). Soient $T_{j,\infty}(\omega,V=0,\xi)$, $j\in\{1,2\}$, les opérateurs générés par les noyaux (5.4) et (5.5) avec $V=0$. Comme conséquence de (5.87) (voir méthode page 128), pour presque tout $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3$:

$$\forall\,\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^3,\quad \mathrm{e}^{-i\omega\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}_0)}T_{j,\infty}(\mathbf{x}+\mathbf{x}_0,\mathbf{y}+\mathbf{x}_0;\omega,V=0,\xi)\mathrm{e}^{i\omega\phi(\mathbf{y},\mathbf{x}_0)}=T_{j,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega,V=0,\xi)$$

Ceci entraîne que la fonction $\mathbb{R}^3\ni\mathbf{x}\mapsto\mathcal{I}^{(0)}_{\infty,n}(\mathbf{x};\beta,\omega,z,\epsilon)$ définie en (5.43) avec $V=0$ est constante (cf. preuve (ii) Proposition 5.26). La preuve du Théorème 5.56 suit à partir des arguments utilisés ci-dessus ainsi que ceux de la preuve du Lemme 5.54.

8.2 Formules explicites en champ magnétique nul

Dans ce paragraphe, on se propose de retrouver quelques résultats démontrés dans [4], [6] et [16]. Partant des expressions des limites thermodynamiques dans le cas $V = 0$, on donne des formules explicites, en terme des fonctions de Bose et de Fermi, des limites thermodynamiques des grandeurs grand-canonique (pression, densité et susceptibilité magnétique par unité de volume) lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle ($\omega = 0$).

Définissons d'abord les fonctions de Bose et de Fermi. Soit $s \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{N}^*$ tel que $\Re s > 0$. La fonction de Bose $g_s(\cdot\,) : \mathbb{C} \setminus [1, +\infty) \to \mathbb{C}$ est définie par (voir par ex. [110]) :

$$\forall\, u \in \mathbb{C} \setminus [1, +\infty), \quad g_s(u) := -\frac{\tilde{\Gamma}(1-s)}{2i\pi} \int_{\mathrm{Hl}} \mathrm{d}t\, \frac{u}{\mathrm{e}^t - u} (-t)^{s-1} \tag{5.88}$$

$\tilde{\Gamma}(\cdot\,)$ est la fonction Gamma d'Euler et Hl est un contour (type Hankel) orienté positivement et contournant l'axe des réels positifs (puisque l'intégrande dans (5.88) possède une coupure le long de l'axe des réels positifs) de la forme :

$$\mathrm{Hl} := \big\{\delta + iy \ : \ -\eta \leq y \leq \eta\big\} \cup \big\{x \pm i\eta \ : \ x \geq \delta\big\} \quad \eta > 0,\ \delta < 0 \tag{5.89}$$

Les réels $\delta < 0$ et $\eta > 0$ sont choisis de telle sorte que le contour Hl soit inclus dans le domaine d'holomorphie de $t \mapsto u/(\mathrm{e}^t - u)$.
La fonction de Fermi $f_s(\cdot\,) : \mathbb{C} \setminus (-\infty, -1] \to \mathbb{C}$ est définie quant à elle par (voir [110]) :

$$\forall\, u \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, -1], \quad f_s(u) := -g_s(-u) = -\frac{\tilde{\Gamma}(1-s)}{2i\pi} \int_{\mathrm{Hl}} \mathrm{d}t\, \frac{u}{\mathrm{e}^t + u} (-t)^{s-1} \tag{5.90}$$

où Hl est un contour de la forme (5.89), l'intégrande dans (5.90) possédant également une coupure le long de l'axe des réels positifs. Les réels $\delta < 0$ et $\eta > 0$ sont choisis de telle sorte que le contour Hl soit inclus dans le domaine d'holomorphie de $t \mapsto u/(\mathrm{e}^t + u)$.

Remarque 5.59. En fait, la fonction de Bose n'est autre que le prolongement analytique au-delà du cercle unité de la fonction polylogarithme (ou fonction de Jonquière) :

$$\mathrm{Li}_s(u) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u^n}{n^s}, \quad |u| < 1 \tag{5.91}$$

qui se réduit à la fonction zeta de Riemann lorsque $u = 1$: $g_s(1) = \zeta(s)$ (voir par ex. [1]).

Soient $\beta > 0$ et $z \in \mathcal{D}_\epsilon := \mathcal{D}_\epsilon(E_0^{(0)}(0)) = \mathcal{D}_\epsilon(0)$. Soit $K \subset \mathcal{D}_\epsilon$ un compact tel que $z \in K$. Par commodité, on utilisera par la suite le contour Γ_K défini en (2.14) avec $\varsigma = 0$:

$$\Gamma_K = \Big\{\alpha + iy \ : \ -\frac{\eta_K}{2\beta} \leq y \leq \frac{\eta_K}{2\beta}\Big\} \cup \Big\{x \pm i\frac{\eta_K}{2\beta} \ : \ \alpha \leq x\Big\} \tag{5.92}$$

avec α un réel satisfaisant $-\infty < \alpha < E_0^{(0)}(0) = 0$ et tel que $K \subset \mathcal{D}_\epsilon(\alpha)$; $\eta_K > 0$ est le réel du Lemme 2.6. Ainsi construit, Γ_K est inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{D}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)$, voir (2.13).

Pression et densité grand-canonique

Proposition 5.60. *Soit $\beta > 0$. Lorsque $\omega = 0$, on a les formules explicites :*

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{-1}, \quad P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, -1) = \beta^{-1}(2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} g_{5/2}(z)$$
$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{+1}, \quad P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, +1) = \beta^{-1}(2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} f_{5/2}(z)$$

où $g_s(\cdot)$ et $f_s(\cdot)$ sont les fonctions de Bose et de Fermi définies en (5.88) *et* (5.90).

Preuve Proposition 5.60.
En vertu de l'expression (5.85) et sous l'hypothèse $\omega = 0$:

$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta}\frac{i}{2\pi}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi) R_\infty^{(1)}(\mathbf{0}, \mathbf{y}; V = 0, \xi)\right)\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}$$

Utilisons maintenant le fait que la fonction de Green soit connue explicitement (voir [60]) :

$$\forall\, (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \setminus D_\infty, \quad R_\infty^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}; 0, \xi) = \frac{1}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \tag{5.93}$$

En développant l'exponentielle en série entière dans (5.93), puis en insérant ce développement dans l'expression de la limite thermodynamique de la pression, il vient :

$$\begin{aligned} P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\beta}\frac{1}{2\pi}\frac{i}{2\pi}\Bigg\{ & \frac{1}{|\mathbf{y}|}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)\right) - \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)\sqrt{-2\xi} + \\ & + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!}\left(\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)(-2\xi)^{\frac{n}{2}}\right)|\mathbf{y}|^{n-1}\Bigg\}\Bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}} \end{aligned} \tag{5.94}$$

et la série dans le membre de droite de (5.94) est absolument convergente.
En effet, il existe une constante $c(\beta, K) > 0$ telle que (voir estimation (2.89)) :

$$\int_{\Gamma_K} |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \xi)|\, |-\xi|^{\frac{n}{2}} \leq c^n(\beta, K)\tilde{\Gamma}(1 + n/2), \quad \tilde{\Gamma}(1 + n/2) = \left(\frac{n}{2}\right)!$$

et pour tout réél $x > 0$, la série $\sum_{k\geq 1} x^k/\left(\frac{k}{2}\right)!$ est convergente.
Par holomorphie de $\mathfrak{f}_\epsilon(\beta, z; \cdot)$ à l'intérieur du contour Γ_K, la première intégrale dans le membre de droite de (5.94) est nulle en vertu du théorème intégrale de Cauchy. Puis en faisant $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ dans la dernière intégrale, (5.94) devient :

$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \frac{\epsilon}{\sqrt{2}\beta\pi}\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})\sqrt{-\xi}$$

Ensuite, par une intégration par parties par rapport à la variable ξ, on a :

$$\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})\sqrt{-\xi} = \frac{2}{3}(-\beta)^{-1}\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{\epsilon z}{\mathrm{e}^{\beta\xi} + \epsilon z}(-\xi)^{\frac{3}{2}}$$

d'où on déduit :

$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \frac{-2}{3\sqrt{2}\pi}\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{z}{\mathrm{e}^{\beta\xi} + \epsilon z}(-\xi)^{\frac{3}{2}} = \frac{-1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}}\frac{4\sqrt{\pi}}{3}\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \frac{z}{\mathrm{e}^{\beta\xi} + \epsilon z}(-\beta\xi)^{\frac{3}{2}}$$

où $\xi \mapsto z/(\mathrm{e}^{\beta\xi} + \epsilon z)$ est la fonction de Fermi-Dirac (lorsque $\epsilon = +1$), de Bose-Einstein (lorsque $\epsilon = -1$) holomorphe à l'intérieur de Γ_K. Par le changement de variable $t := \beta\xi$:

$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = -\beta^{-1} \frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}} \frac{4\sqrt{\pi}}{3} \frac{1}{2i\pi} \int_{\hat{\Gamma}_K} \mathrm{d}t \, \frac{z}{\mathrm{e}^t + \epsilon z} (-t)^{\frac{3}{2}}$$

où $\hat{\Gamma}_K$ est le contour dilaté défini par :

$$\hat{\Gamma}_K := \left\{ \beta\alpha + iy \ : \ -\frac{\eta_K}{2} \leq y \leq \frac{\eta_K}{2} \right\} \cup \left\{ x \pm i\frac{\eta_K}{2} \ : \ \alpha\beta \leq x \right\} \tag{5.95}$$

Il ne reste plus qu'à utiliser (5.88) et (5.90) pour obtenir finalement :

$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, -1) = \beta^{-1} \frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}} \frac{4\sqrt{\pi}}{3} \frac{1}{\tilde{\Gamma}(-3/2)} g_{5/2}(z)$$
$$P_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, +1) = \beta^{-1} \frac{1}{(2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}} \frac{4\sqrt{\pi}}{3} \frac{1}{\tilde{\Gamma}(-3/2)} f_{5/2}(z), \quad \tilde{\Gamma}(-3/2) = 4\sqrt{\pi}/3$$

■

En réadaptant la preuve de la Proposition 5.60, on obtient immédiatement :

Proposition 5.61. *Soit $\beta > 0$. Lorsque $\omega = 0$, on a les formules explicites :*

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{-1}, \quad \rho_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, -1) = (2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} g_{3/2}(z) \tag{5.96}$$
$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{+1}, \quad \rho_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, +1) = (2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} f_{3/2}(z) \tag{5.97}$$

où $g_s(\cdot)$ et $f_s(\cdot)$ sont les fonctions de Bose et de Fermi définies en (5.88) *et* (5.90).

Remarque 5.62. Dans l'appendice 1 de ce chapitre, on a spécifié qu'il y a présence du phénomène de condensation de Bose-Einstein (de type I) pour le gaz parfait de bosons lorsque le champ magnétique est nul. En effet, la densité critique $\rho_c(\beta, 0)$ est finie :

$$\rho_c^{(0)}(\beta, 0) := \lim_{\mu \to E_0^{(0)}(0) = 0} \rho_\infty^{(0)}(\beta, 0, \mathrm{e}^{\beta\mu}, -1) = (2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} g_{3/2}(1) = (2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} \zeta(3/2) < +\infty$$

où on a utilisé dans la seconde égalité la Remarque 5.59.

Aimantation et susceptibilité magnétique (par unité de volume) grand-canonique

Lorque le champ magnétique est nul, l'aimantation grand-canonique est nulle :

$$\forall\, \beta > 0, \ \forall\, z \in \mathcal{D}_\epsilon, \quad \mathcal{X}_\infty^{1,(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = 0$$

Ce résultat a déjà été prouvé dans le cas d'un potentiel périodique, voir Corollaire 5.7. Remarquons que l'on peut retrouver directement ce résultat à partir de l'expression (5.86) avec $n = 1$. En effet, en vertu de l'expression explicite de la fonction de Green en (5.93) :

$$\partial_{x_j} \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = -(x_j - y_j) \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^3} - \sqrt{-2\xi}(x_j - y_j) \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}, \quad j \in \{1, 2, 3\}$$

puis en utilisant que $\mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{1}{2}(y_2 - x_2, x_1 - y_1, 0)$, il vient :

$$T_{1,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y}; V=0,\xi) = \mathbf{a}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \left(i\nabla_{\mathbf{x}} \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \right) = 0, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y} \tag{5.98}$$

Pour finir, on souhaite redémontrer que dans le cas d'un gaz d'électrons libres et dans la limite des faibles températures (i.e. gaz d'électrons fortement dégénéré), la contribution dominante à la limite thermodynamique de la susceptibilité magnétique grand-canonique par unité de volume[3], en champ magnétique nul et à densité fixée, est purement diamagnétique et est donnée par la "formule de Landau" (voir par ex. [70], [4]).

Pour cela, on a besoin d'abord du résultat suivant :

Proposition 5.63. *Soit $\beta > 0$. Alors lorsque $\omega = 0$, on a les formules explicites :*

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{-1}, \quad \mathcal{X}_{\infty}^{2,(0)}(\beta, 0, z, -1) = -\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{1}{12\sqrt{\beta}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} g_{1/2}(z) \tag{5.99}$$

$$\forall\, z \in \mathcal{D}_{+1}, \quad \mathcal{X}_{\infty}^{2,(0)}(\beta, 0, z, +1) = -\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{1}{12\sqrt{\beta}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} f_{1/2}(z) \tag{5.100}$$

où $g_s(\cdot)$ et $f_s(\cdot)$ sont les fonctions de Bose et de Fermi définies en (5.88) *et* (5.90).

Preuve Proposition 5.63.
Partant de (5.86) (cas $n = 2$) et compte-tenu de (5.98), il vient :

$$\mathcal{X}_{\infty}^{2,(0)}(\beta, \omega = 0, z, \epsilon) := -2\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{\epsilon}{\beta} \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_{\epsilon}(\beta, z; \xi) \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_{\infty}^{(1)}(\mathbf{0}, \mathbf{z}; 0, \xi) T_{2,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{0}; 0, \xi)$$

Utilisant la définition du noyau $T_{2,\infty}(\cdot\,,\cdot\,; 0, \xi)$ compte-tenu de (5.93), on a :

$$\forall\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R_{\infty}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}; 0, \xi) T_{2,\infty}(\mathbf{z}, \mathbf{x}; 0, \xi) = \frac{1}{8} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|} \left[(z_1 - x_1)^2 + (z_2 - x_2)^2\right] \frac{\mathrm{e}^{-\sqrt{-2\xi}|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}}{|\mathbf{z}-\mathbf{x}|}$$

Puis en adoptant le système de coordonnées sphériques usuel, il vient :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, \frac{\mathrm{e}^{-2\sqrt{-2\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{z}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2} \left[(z_1 - x_1)^2 + (z_2 - x_2)^2\right] = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin^3\theta \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r\, r^2 \mathrm{e}^{-2\sqrt{-2\xi}r} = 2\pi \frac{4}{3} \frac{2}{2^3(-2\xi)^{\frac{3}{2}}}$$

En réunissant ces deux derniers résultats, on obtient :

$$\mathcal{X}_{\infty}^{2,(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^2 \beta \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\epsilon}{12\sqrt{\beta}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma_K} \mathrm{d}\xi\, \ln(1 + \epsilon z \mathrm{e}^{-\beta\xi})(-\beta\xi)^{-\frac{3}{2}}$$

[3] Dans notre modèle, il s'agit en fait de la susceptibilité "orbitale" puisque seuls les moments magnétiques orbitaux des particules du gaz sont pris en compte (pas les moments magnétiques de spin).

En effectuant une intégration par parties par rapport à la variable ξ puis en faisant le changement de variable $t := \beta\xi$ comme dans la preuve de la Proposition 5.60, on obtient :

$$\mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, z, \epsilon) = \left(\frac{q}{c}\right)^2 \sqrt{\pi} \frac{1}{12\sqrt{\beta}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{2i\pi} \int_{\hat{\Gamma}_K} \mathrm{d}t \, \frac{z}{\mathrm{e}^t + \epsilon z} (-t)^{-\frac{1}{2}}$$

où $\hat{\Gamma}_K$ défini en (5.95) est inclus dans le domaine d'holomorphie de $t \mapsto z/(\mathrm{e}^t + \epsilon z)$. Il ne reste plus qu'à utiliser les définitions (5.88) et (5.90) sachant que $\tilde{\Gamma}(1/2) = \sqrt{\pi}$.

■

Remarque 5.64. En vertu de la Remarque 5.59, $\lim_{z\to 1} g_{1/2}(z) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{\sqrt{n}} = +\infty$. Le gas de bosons devient donc un diamagnet parfait au point de condensation :

$$\lim_{z\to 1} \mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, z, -1) = -\left(\frac{q}{c}\right)^2 \frac{1}{12\sqrt{\beta}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \lim_{z\to 1} g_{1/2}(z) = -\infty$$

Considérons maintenant le cas des électrons (la charge $q = -e$) et supposons que la densité de particules $\rho_0 > 0$ devient un paramètre fixé. On a alors :

Proposition 5.65. *Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$ fixés. En champ magnétique nul, la limite thermodynamique de la susceptibilité magnétique (par unité de volume) en* (5.100) *s'écrit :*

$$\mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, \rho_0, +1) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12\sqrt{\beta}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} f_{1/2}\big(f_{3/2}^{-1}((2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}\rho_0)\big)$$

Soit $k_F := (6\pi^2\rho_0)^{\frac{1}{3}}$ le vecteur d'onde de Fermi. Alors lorsque $\beta \to +\infty$, on a le développement asymptotique :

$$\mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, \rho_0, +1) = -\frac{e^2 k_F}{24\pi^2 c^2} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \tag{5.101}$$

La contribution dominante, qui est purement diamagnétique, est communément appelée "formule de Landau" pour le gaz d'électrons libres fortement dégénéré.

Preuve Proposition 5.65.
Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 \in (0, +\infty)$ fixés. D'après la Proposition 5.33, il existe un unique $z_\infty = z_\infty(\beta, 0, \rho_0, +1) \in (0, +\infty)$ solution de l'équation :

$$\rho_0 = \rho_\infty^{(0)}(\beta, 0, z, +1) = (2\pi\beta)^{-\frac{3}{2}} f_{3/2}(z) \tag{5.102}$$

où on a utilisé (5.97) dans la seconde égalité. En inversant la relation (5.102), on obtient :

$$\mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, \rho_0, +1) = \mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, 0, z_\infty, +1) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12\sqrt{\beta}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} f_{1/2}\big(f_{3/2}^{-1}((2\pi\beta)^{\frac{3}{2}}\rho_0)\big)$$

Enfin, le développement asymptotique lorsque $\beta \to +\infty$ est donné dans [4] :

$$\mathcal{X}_\infty^{2,(0)}(\beta, \rho_0, 0, +1) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12\pi^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\rho_0\right)^{\frac{1}{3}} + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

■

Remarque 5.66. L'expression obtenue ci-dessus pour la "formule de Landau" est deux fois plus petite que celle dans [70] (et dans la littérature en générale) puisque nous n'avons pas pris en compte la dégénérescence liée au spin des électrons.

Remarque 5.67. La plupart des résultats de cet appendice ont été démontré dans [6] avec la jauge de Landau : $\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(-x_2, 0, 0)$. Les résultats sont donc invariants de jauge.

9 Annexe

Théorème 5.68. *Théorème d'Hurwitz (pour sa démonstration, voir par ex. [45])*
Soit $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{C}$ un ouvert non vide. Soit $\{f_n(\cdot)\}_{n\geq 1} : \mathcal{U} \to \mathbb{C}$ une suite de fonctions analytiques convergeant uniformément sur tout compact de $\mathcal{U}$ vers la fonction (analytique) $f : \mathcal{U} \to \mathbb{C}$. Supposons de plus que chaque fonction $f_n(\cdot)$ ne s'annule pas sur $\mathcal{U}$.
Alors soit f est identiquement nulle, soit f ne possède pas de zéro dans $\mathcal{U}$.

Preuve Lemme 5.23.
Pour tout $x_i \in (-L/2, L/2)$ et pour tout $y_i \in (-\infty, -L/2) \cup (L/2, +\infty)$, $i \in \{1, 2, 3\}$:

$$\frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^k} \leq \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{2}|x_1-y_1|}}{|x_1-y_1|} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{2}\sqrt{(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2}}}{((x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2)^{\frac{k-1}{2}}} \quad k \in \{1,2\},\ \gamma > 0$$

En posant $\hat{\mathbf{x}} = (x_2, x_3)$ et $\hat{\mathbf{y}} = (y_2, y_3)$, par passage en coordonnées polaires :

$$\operatorname*{ess\,sup}_{\hat{\mathbf{x}}\in\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}\hat{\mathbf{y}}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{2}|\hat{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{y}}|}}{|\hat{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{y}}|^{k-1}} \leq c\gamma^{-(1+k)}, \quad c > 0$$

D'autre part, pour tout $x_1 \in (-L/2, L/2)$:

$$\int_{-\infty}^{-L/2} \mathrm{d}y_1\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{2}|x_1-y_1|}}{|x_1-y_1|} = -\mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}(x_1+L/2)\Big), \quad \int_{L/2}^{+\infty} \mathrm{d}y_1\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{2}|x_1-y_1|}}{|x_1-y_1|} = -\mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}(L/2-x_1)\Big)$$

où $x \mapsto \mathrm{Ei}(x)$ est la fonction exponentielle intégrale définie par (voir par ex. [1]) :

$$\mathrm{Ei}(x) := -\int_{-x}^{+\infty} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{t} = \int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{e}^{t}}{t}$$

et l'intégrale doit être comprise en termes de valeur principale de Cauchy.
Il s'ensuit alors que :

$$\int_{\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Lambda_L} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \frac{\mathrm{e}^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^k} \leq c\gamma^{-(1+k)} L^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_1 \Big\{-\mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}(x_1+L/2)\Big) - \mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}(L/2-x_1)\Big)\Big\}$$

Il ne reste plus qu'à utiliser qu'il existe une constante $c > 0$ telle que :

$$-\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x_1\, \mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}(x_1+L/2)\Big) \leq -\int_0^{+\infty} \mathrm{d}\tilde{x}_1\, \mathrm{Ei}\Big(-\frac{\gamma}{2}\tilde{x}_1\Big) \leq c\gamma^{-1}$$

car $\forall\, y > 0$, $-\mathrm{Ei}(-y) < \mathrm{e}^{-y}\ln(1+1/y) < \mathrm{e}^{-y}y^{-\frac{1}{2}}$ (la première inégalité vient de [1]).

■

Chapitre 6

Une preuve rigoureuse de la formule de Landau-Peierls

Le point de départ est l'expression de la limite thermodynamique de la susceptibilité magnétique (par unité de volume) grand-canonique en (5.10), qui est précisément la contribution à la susceptibilité magnétique liée uniquement aux moments magnétiques orbitaux des particules. Dans le cas d'un gaz d'électrons ($\epsilon = +1$) et sous l'hypothèse supplémentaire $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3/\boldsymbol{\Upsilon})$, l'objectif de ce chapitre est double :
(1). Etablir, dans la limite des faibles températures, une expression de la susceptibilité magnétique des électrons de conduction lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle et la densité de particules fixée. Cette expression doit tenir compte de la conjecture de Bethe-Sommerfeld (voir page 182). On traitera séparément le cas des semi-conducteurs et le cas des métaux ; quant au cas des semi-métaux, il ne sera pas abordé.
(2). Déterminer les hypothèses de validité de l'approximation de Landau-Peierls selon laquelle la contribution dominante, à la susceptibilité magnétique "orbitale" des électrons de conduction d'un métal à température nulle, est purement diamagnétique et est donnée par la (célèbre) "formule de Landau-Peierls" (voir par ex. [87], [2], [66], etc...).

Dans ce chapitre, on omet la dépendance explicite en V dans les notations et comme les résultats énoncés ne concernent que le gaz de fermions, on supprime le paramètre ϵ.

1 Résultats principaux

Hypothèses, nouvelles notations et rappels de résultats

Considérons un gaz quantique constitué d'un grand nombre de particules non relativistes, de masse $m > 0$ et de charge $q = -e$, obéissant à la statistique de Fermi-Dirac. Leur spin n'est pas considéré puisqu'on s'intéresse seulement à la contribution à la susceptibilité magnétique (par unité de volume) liée aux moments magnétiques "orbitaux" des particules. Le gaz est confiné à l'intérieur d'une "boîte" et est sujet à un champ magnétique extérieur uniforme. De plus, le gaz est supposé quasi-parfait dans le sens où chaque particule interagit avec un potentiel d'origine électrique ; les intéractions entre particules sont négligées. Le potentiel électrique étant choisi périodique ; on parle alors, dans ce cas, de gaz d'électrons de Bloch. Enfin le gaz est supposé à l'équilibre thermique.

Précisons davantage ces hypothèses. Le gaz est piégé à l'intérieur d'une large boîte cu-

bique $\Lambda_L = (-L/2, L/2)^3$, avec $L \geq 1$. On considère un champ magnétique $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ avec $B \geq 0$, parallèle à la troisième composante de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. On lui associe le potentiel vecteur magnétique $A(\mathbf{x})$ qui s'écrit dans la jauge de Coulomb : $A(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x} = B\mathbf{a}(\mathbf{x})$, avec $\mathbf{a}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2}(-x_2, x_1, 0)$ (jauge symétrique).

Le potentiel électrique $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3)$ est une fonction à valeurs réélles et périodique par rapport à un réseau de Bravais $\boldsymbol{\Upsilon}$ de cellule élémentaire Ω (cellule de Wigner-Seitz). Sans perte de généralité, on supposera que $\boldsymbol{\Upsilon} \equiv \mathbb{Z}^3$ (réseau cubique) ; par conséquent $\Omega = (-1/2, 1/2)^3$ est le cube unité centré en l'origine des coordonnées. Un tel potentiel modélise, dans l'approximation de Born-Oppenheimer, l'interaction de chaque particule avec le champ cristallin d'un solide parfait (i.e. réseau infini où chaque site est occupé par une même espèce d'ions statiques).

Quand la boîte est finie, i.e. $1 \leq L < \infty$, la dynamique de chaque particule est décrite par l'Hamiltonien défini sur $L^2(\Lambda_L)$ avec conditions de bords de Dirichlet sur $\partial\Lambda_L$ par (ici on fait le choix des unités atomiques $\hbar = 1 = m$) :

$$H_L(\omega) = \frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))^2 + V_L(\mathbf{x}), \quad \omega := -eB/c \in \mathbb{R} \quad \text{(unités C.G.S.)}$$

où V_L est la restriction de V à Λ_L. La fréquence cyclotron ω_c est reliée à ω par $\omega_c = -\omega$. En raison de la régularité de Λ_L, l'opérateur $H_L(\omega)$ est auto-adjoint sur le domaine $D(H_L(\omega)) = \mathcal{H}_0^1(\Lambda_L) \cap \mathcal{H}^2(\Lambda_L)$. Par des arguments standards (voir [91]), $H_L(\omega)$ est borné inférieurement et est à résolvante compacte. Par la suite, $\{e_j(\omega)\}_{j\geq 1}$ désignera l'ensemble de ses valeurs propres comptées avec leur multiplicité et indexées dans un ordre croissant.

Quand $L = \infty$, on désignera par $H_\infty(\omega)$ l'unique extension auto-adjointe de l'opérateur

$$\frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{x}} - \omega\mathbf{a}(\mathbf{x}))^2 + V(\mathbf{x}) \qquad (\hbar = 1 = m)$$

défini sur $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. $H_\infty(\omega)$ est borné inférieurement et n'a que du spectre essentiel (cf. [20]).

Introduisons les grandeurs à volume fini caractéristiques de la réponse (dia)magnétique du gaz de fermions. On utilise le formalisme grand-canonique de la mécanique statistique dans lequel le jeu de paramètres fixés est $(\beta, z, |\Lambda_L|)$. Ici $\beta := (k_B T)^{-1} > 0$ désigne "l'inverse" de la température T (k_B est la constante de Boltzmann), $z := \mathrm{e}^{\beta\mu} \in (0, +\infty)$ désigne la fugacité ($\mu \in \mathbb{R}$ est le potentiel chimique) et $|\Lambda_L| = L^3$ est le volume du confinement. Pour $\beta > 0$, $z \in (0, +\infty)$ et $\omega \in \mathbb{R}$, la pression et la densité grand-canonique à volume fini du gaz sont données par :

$$P_L(\beta, z, \omega) := \frac{1}{\beta|\Lambda_L|}\mathrm{Tr}_{L^2(\Lambda_L)} \ln\left(\mathbb{1} + z\mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega)}\right) = \frac{1}{\beta|\Lambda_L|}\sum_{j=1}^{\infty} \ln\left(1 + z\mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}\right)$$

$$\rho_L(\beta, z, \omega) := \beta z \frac{\partial P_L}{\partial z}(\beta, z, \omega) = \frac{1}{|\Lambda_L|}\sum_{j=1}^{\infty} \frac{z\mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}}{1 + z\mathrm{e}^{-\beta e_j(\omega)}}$$

Le semi-groupe $\mathrm{e}^{-\beta H_L(\omega)}$ étant un opérateur à trace, les séries ci-dessus sont absolument convergentes (voir Remarque 1.38). Puisque la fonction $\mathbb{R} \ni \omega \mapsto P_L(\beta, z, \omega)$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ (voir Théorème 2.1), on peut définir la susceptibilité magnétique grand-canonique à

volume fini comme la dérivée seconde de la pression grand-canonique à volume fini par rapport à l'intensité du champ magnétique B :

$$\mathcal{X}_L^2(\beta, z, \omega) := \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_L}{\partial \omega^2}(\beta, z, \omega), \quad \beta > 0,\ z \in (0, +\infty),\ \omega \in \mathbb{R}$$

Lorsque Λ_L remplit l'espace tout entier (i.e. à la limite $L \to \infty$), les limites thermodynamiques des trois quantités introduites ci-dessus existent (cf. chapitre 5).
En désignant par $P_\infty(\beta, z, \omega) := \lim_{L\to\infty} P_L(\beta, z, \omega)$, on a prouvé en particulier :

$$\rho_\infty(\beta, z, \omega) := \beta z \frac{\partial P_\infty}{\partial z}(\beta, z, \omega) = \lim_{L\to\infty} \beta z \frac{\partial P_L}{\partial z}(\beta, z, \omega)$$
$$\mathcal{X}_\infty^2(\beta, z, \omega) := \lim_{L\to\infty} \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_L}{\partial \omega^2}(\beta, z, \omega) = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_\infty}{\partial \omega^2}(\beta, z, \omega)$$

et la limite commute avec la première dérivée partielle (resp. la seconde dérivée partielle) de la pression grand-canonique par rapport à la fugacité z (resp. par rapport à l'intensité du champ magnétique).

Supposons maintenant que l'intensité du champ magnétique soit nulle et que la densité de particules $\rho_0 > 0$ devienne un paramètre fixé. En vertu des résultats de l'appendice 1 du chapitre 5 (cf. Proposition 5.33), soit $\mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ l'unique solution de l'équation :

$$\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \rho_0$$

La susceptibilité "orbitale"[1] en champ magnétique nul, à température positive et à densité $\rho_0 > 0$ fixées est alors définie comme :

$$\mathcal{X}(\beta, \rho_0) := \mathcal{X}_\infty^2(\beta, e^{\beta\mu_\infty(\beta,\rho_0)}, \omega = 0)$$

Afin de formuler nos principaux résultats, on a besoin d'introduire d'autres notations. Dans le cas où $\omega = 0$, la théorie de Bloch-Floquet pour les opérateurs périodiques (voir par ex. [11], [68]) permet de mettre en évidence la structure en bandes du spectre de l'opérateur $H_\infty(0)$. Si $\Omega^* = 2\pi\Omega$ désigne la (première) zone de Brillouin du réseau dual $\boldsymbol{\Upsilon}^* \equiv 2\pi\mathbb{Z}^3$, pour $j \in \mathbb{N}^*$, la j-ème bande de Bloch est définie par $\mathcal{E}_j := [\min_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_j(\mathbf{k}), \max_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_j(\mathbf{k})]$ où $\{E_j(\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ est l'ensemble des valeurs propres (comptées avec leur multiplicité et *indexées dans un ordre croissant*) de la fibre $H(\mathbf{k}) := \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V$ agissant dans $L^2(\mathbb{T}^3)$ avec $\mathbb{T}^3 := \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ le tore à trois dimensions. Notons qu'avec cette définition, les fonctions d'énergie de Bloch $\mathbf{k} \mapsto E_j(\mathbf{k})$ sont continues mais *pas nécessairement différentiables par rapport à* $\mathbf{k}$ *aux points de croisement*. Le spectre de l'opérateur $H_\infty(0)$ est absolument continu et donné par $\sigma(H_\infty(0)) = \cup_{j=1}^\infty \mathcal{E}_j$. Les ensembles $\mathcal{E}_j$ peuvent se chevaucher et certains peuvent même coïncider. Les bandes d'énergie correspondent aux unions disjointes des $\mathcal{E}_j$. On parle de gap spectral si $\max \mathcal{E}_j < \min \mathcal{E}_{j+1}$, $j \geq 1$. *Le nombre de gaps dans le spectre est fini (si non nul) : c'est la conjecture de Bethe-Sommerfeld*, voir par ex. [102], [74].

[1] Désormais, on désignera par susceptibilité "orbitale" la limite thermodynamique de la contribution, à la susceptibilité magnétique grand-canonique (par unité de volume), liée aux moments magnétiques orbitaux des électrons de Bloch.

Il reste à introduire la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(0)$. Rappelons sa définition. Pour $E \in \mathbb{R}$, soit $N_L(E)$ le nombre de valeurs propres de $H_L(0)$ plus petites que E. La densité d'états intégrée de $H_\infty(0)$ est définie par la limite (voir par ex. [43]) :

$$n_\infty(E) := \lim_{L\to\infty} \frac{N_L(E)}{|\Lambda_L|} = \lim_{L\to\infty} \frac{\mathrm{Tr}\big\{\chi_{(-\infty,E]}(H_L(0))\big\}}{|\Lambda_L|} \tag{6.1}$$

Enoncés des résultats principaux

Le premier théorème n'est pas directement relié au problème magnétique. Il traite de la définition rigoureuse de l'énergie de Fermi pour le gaz d'électrons de Bloch. Bien que ces résultats soient bien connus de la littérature physique (voir [7], [65], etc..), nous n'avons pas trouvé jusqu'à présent de traitement rigoureux.

Théorème 6.1. *Soit $\rho_0 > 0$ la densité de particules fixée. Soit $\mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \rho_0$. Alors la limite :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) := \lim_{\beta\to+\infty} \mu_\infty(\beta, \rho_0)$$

existe et définie une fonction croissante, éventuellement discontinue, appelée l'énergie de Fermi. On distingue seulement deux cas :

***SC** (semi-métal/semi-conducteur/isolant) : supposons qu'il existe $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $\rho_0 = n_\infty(E)$ pour tout $E \in [\max \mathcal{E}_N, \min \mathcal{E}_{N+1}]$, alors :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) = \frac{\max \mathcal{E}_N + \min \mathcal{E}_{N+1}}{2} \tag{6.2}$$

***M** (métal) : supposons qu'il existe une unique solution E_M à l'équation $n_\infty(E_M) = \rho_0$ appartenant à $(\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N)$ avec $N \in \mathbb{N}^*$ éventuellement non unique. Alors :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) = E_M \tag{6.3}$$

Remarque 6.2. En d'autres termes, un semi-conducteur[2] a son énergie de Fermi soit au milieu d'un gap non trivial (i.e. lorsque $\max \mathcal{E}_N < \min \mathcal{E}_{N+1}$), soit à l'endroit où les deux bandes de Bloch consécutives "se touchent" fermant ainsi le gap (i.e. si $\max \mathcal{E}_N = \min \mathcal{E}_{N+1}$). Dans ce dernier cas, on parle usuellement de semi-métal. Quant au métal, son énergie de Fermi se situe à l'intérieur d'une bande de Bloch.

Remarque 6.3. D'après les résultats ci-dessus, $\mathcal{E}_F(\cdot)$ est discontinue en toutes les valeurs de ρ_0 pour lesquelles l'équation $n_\infty(E) = \rho_0$ n'a pas une unique solution. Il s'ensuit alors que chaque gap ouvert donne lieu à une telle discontinuité.

Voici le résultat principal de ce chapitre concernant la susceptibilité "orbitale" (par unité de volume) d'un gaz d'électrons de Bloch à densité fixée et à température nulle :

[2] Il s'agit ici d'un semi-conducteur *intrinsèque*, i.e. sans impuretés.

Théorème 6.4. *Soit* $E_0 := \inf \sigma(H_\infty(0))$.
(i). Supposons que l'énergie de Fermi se situe au milieu d'un gap non trivial, voir (6.2). *Alors il existe* $2N$ *fonctions* $\mathfrak{c}_j, \mathfrak{d}_j$, *avec* $1 \leq j \leq N$, *définies sur* Ω^* *en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles que l'intégrande ci-dessous puisse être prolongé par continuité sur tout* Ω^* *et :*

$$\mathcal{X}_{\mathrm{SC}}(\rho_0) := \lim_{\beta \to +\infty} \mathcal{X}(\beta, \rho_0) = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{j=1}^{N} \Big\{ \mathfrak{c}_j(\mathbf{k}) + \big\{E_j(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\} \mathfrak{d}_j(\mathbf{k}) \Big\} \tag{6.4}$$

(ii). Supposons qu'il existe un unique $N \in \mathbb{N}^*$ *tel que* $\mathcal{E}_F(\rho_0) \in (\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N)$.
Supposons que $\mathcal{S}_F := \big\{\mathbf{k} \in \Omega^* \,:\, E_N(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\}$ *soit une surface lisse et non dégénérée. Alors il existe* $2N+1$ *fonctions* $\mathcal{G}_N, \mathfrak{c}_j, \mathfrak{d}_j$, *avec* $1 \leq j \leq N$, *définies sur* Ω^* *en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles qu'elles soient continues sur* $\mathcal{S}_F$ *et telles que le second intégrande ci-dessous puisse être prolongé par continuité sur tout* Ω^* *:*

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) := \lim_{\beta \to +\infty} \mathcal{X}(\beta, \rho_0) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12} \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \tag{6.5}$$

$$\cdot \Bigg\{ \int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{\big|\nabla_{\mathbf{k}} E_N(\mathbf{k})\big|} \left[\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_N(\mathbf{k}) \right] +$$

$$- 6 \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{j=1}^{N} \Big[\chi_{[E_0, \mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_j(\mathbf{k})) \mathfrak{c}_j(\mathbf{k}) + \big\{E_j(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_F(\rho_0)\big\} \chi_{[E_0, \mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_j(\mathbf{k})) \mathfrak{d}_j(\mathbf{k}) \Big] \Bigg\}$$

où $\chi_{[E_0, \mathcal{E}_F(\rho_0)]}(\cdot)$ *est la fonction caractéristique de l'intervalle* $[E_0, \mathcal{E}_F(\rho_0)]$.
(iii). Soit $k_F := (6\pi^2 \rho_0)^{\frac{1}{3}}$ *le vecteur d'onde de Fermi. Alors lorsque* $\rho_0 \to 0$, (6.5) *donne la formule de Landau-Peierls :*

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) = -\frac{e^2}{24\pi^2 c^2} \frac{(m_1^* m_2^* m_3^*)^{\frac{1}{3}}}{m_1^* m_2^*} k_F + o(k_F) \tag{6.6}$$

avec $\left[\frac{1}{m_i^*}\right]_{1 \leq i \leq 3}$ *les valeurs propres de la Hessienne* $\{\partial^2_{k_i k_j} E_1(\mathbf{0})\}_{1 \leq i,j \leq 3}$ *définie positive.*

Remarque 6.5. Les fonctions $\mathfrak{c}_j(\cdot)$ et $\mathfrak{d}_j(\cdot)$, $1 \leq j \leq N$, qui apparaissent dans (6.4) sont les mêmes que celles dans (6.5). Toutes ces fonctions peuvent s'écrire *explicitement* en termes des fonctions d'énergie de Bloch et de leurs fonctions propres associées, ce qui rend les expressions (6.4) et (6.5) adaptées à l'analyse numérique (avec un modèle de bandes).

Remarque 6.6. Les fonctions $\mathfrak{c}_j(\cdot)$ et $\mathfrak{d}_j(\cdot)$ peuvent avoir des singularités locales sur un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro où les bandes de Bloch éventuellement se "touchent". Cependant, leurs combinaisons entrant dans les intégrandes ci-dessus sont toujours bornées car les singularités individuelles s'annulent par l'intermédiaire de la somme.

Remarque 6.7. Dans *(iii)*, lorsque $m_1^* = m_2^* = m_3^* = m^*$, (6.6) n'est rien d'autre que la formule usuelle (voir par ex. [66]) de la susceptibilité de Landau-Peierls :

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) \sim -\frac{e^2}{24\pi^2 m^* c^2} k_F \quad \text{lorsque} \quad k_F \to 0. \tag{6.7}$$

A noter que l'expression (6.7) est deux fois plus petite que celle dans [87] puisque nous n'avons pas pris en compte la dégénérescence liée au spin des électrons de Bloch.

Remarque 6.8. L'hypothèse $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$ peut être affaiblie en $V \in \mathcal{C}^r(\mathbb{T}^3)$, avec $r \geq 23$.

Remarque 6.9. Les résultats énoncés dans le Théorème 6.4 ne prennent pas en compte le cas des semi-métaux pour lesquels $\mathcal{E}_F(\rho_0) = \max \mathcal{E}_N = \min \mathcal{E}_{N+1}$, $N \geq 1$.

2 L'énergie de Fermi des électrons de Bloch

Cette section traite de la localisation de l'énergie de Fermi lorsque l'intensité du champ magnétique est nulle (i.e. $\omega = 0$). En particulier, on démontre le Théorème 6.1.
Bien qu'on ait supposé dans l'introduction de ce chapitre que $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$, tous les résultats de cette section peuvent être étendus par exemple à $V \in L^p(\mathbb{T}^3)$, $p > 3$ (cf. Remarque 5.9).

2.1 Résultats préparatoires

Dans ce paragraphe, on montre qu'à température nulle (i.e. $\beta \to +\infty$), la limite thermodynamique de la densité grand-canonique en champ magnétique nul est identiquement égale à la densité d'états intégrée de l'opérateur $H_\infty(0)$. On donne également quelques propriétés sur la densité d'états intégrée au voisinage des bords d'un gap.

Soient $\beta > 0$ et $z := \mathrm{e}^{\beta\mu} \in (0, +\infty)$ les paramètres fixés. Soit $\xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta, z; \xi) := \ln(1 + z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$ la fonction holomorphe sur le domaine (cf. Lemme 1.39) :

$$\mathfrak{C} := \big\{\xi \in \mathbb{C} \ : \ \Im\xi \in (-\pi/\beta, \pi/\beta)\big\} \tag{6.8}$$

Soit γ le contour orienté positivement et inclus dans $\mathfrak{C}$ défini par :

$$\gamma := \big\{\delta + iy, \ y \in [-\pi/2\beta, \pi/2\beta]\big\} \cup \big\{x \pm i\pi/2\beta, \ x \geq \delta\big\} \quad \delta := E_0 - 1, \ E_0 := \inf \sigma(H_\infty(0)) \tag{6.9}$$

Notons $R_\infty(\omega, \xi) := (H_\infty(\omega) - \xi)^{-1}$, $\xi \in \rho(H_\infty(\omega))$ et $\omega \in \mathbb{R}$. A partir du Corollaire 5.2 et compte-tenu de l'expression (5.8), la limite thermodynamique de la densité grand-canonique du gaz d'électrons de Bloch est définie par :

$$\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega) := \frac{\partial P_\infty}{\partial \mu}(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega) = \frac{1}{|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\bigg\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi \, \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi) R_\infty(\omega, \xi)\bigg\} \tag{6.10}$$

où Ω est le cube unité centré en l'origine des coordonnées (puisqu'on a supposé que V est périodique relativement au réseau cubique $\mathbb{Z}^3$), χ_Ω est la fonction caractéristique de Ω, et $\mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi) = -\beta^{-1}\partial_\xi \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi) = (\mathrm{e}^{\beta(\xi-\mu)} + 1)^{-1}$ est la fonction distribution de Fermi-Dirac. D'après les résultats du chapitre 5, $\rho_\infty(\beta, \cdot, \omega)$ vue comme une fonction de z, peut être étendue analytiquement sur le domaine $\mathcal{D}_{+1}(E_0(\omega)) = \mathbb{C} \setminus (-\infty, -\mathrm{e}^{\beta E_0(\omega)}]$.

Remarque 6.10. Un autre moyen de définir la limite thermodynamique de la densité grand-canonique du gaz d'électrons de Bloch est de faire intervenir la densité d'états intégrée de $H_\infty(\omega)$ (pour la méthode, cf. paragraphe 3.2, chapitre 5) :

$$\rho_\infty(\beta, e^{\beta\mu}, \omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \lambda}(\beta, \mu; \lambda) n_\infty(\lambda, \omega) \tag{6.11}$$

avec la notation $n_\infty(\cdot, \omega = 0) = n_\infty(\cdot)$.

Supposons maintenant que l'intensité du champ magnétique soit nulle (i.e. $\omega = 0$). Afin de réécrire (6.10) en termes des fonctions d'énergie de Bloch de l'opérateur $H_\infty(0)$, rappelons quelques notations. Soit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ l'espace de Schwartz des fonctions à décroissance rapide et considérons l'isométrie de Bloch :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{U} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \mapsto L^2(\Omega^*, L^2(\Omega)) = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, L^2(\Omega) \\
&(\mathcal{U}f)(\underline{\mathbf{x}}; \mathbf{k}) = \frac{1}{|\Omega^*|^{\frac{1}{2}}} \sum_{\boldsymbol{\upsilon} \in \mathbb{Z}^3} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon})} f(\underline{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\upsilon}), \quad \mathbf{k} \in \Omega^*,\ \underline{\mathbf{x}} \in \Omega,\ f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)
\end{aligned}$$

qui peut être étendue par continuité en un opérateur unitaire sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. On identifie l'espace de Hilbert $L^2(\Omega)$ avec $L^2(\mathbb{T}^3)$, où $\mathbb{T}^3 := \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ est le tore à 3 dimensions. Après une transformation unitaire de Bloch (voir par ex. [11], [93]), $H_\infty(0) := \frac{1}{2}(-i\nabla) + V$ est décomposable en intégrale directe $\mathcal{U}H_\infty(0)\mathcal{U}^* = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, H(\mathbf{k})$ où la fibre $H(\mathbf{k})$ agissant dans $L^2(\mathbb{T}^3)$ est donnée par :

$$H(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V, \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$

Rappelons que $H(\mathbf{k})$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$; le domaine de sa fermeture est l'espace de Sobolev $\mathcal{H}^2(\mathbb{T}^3)$. Pour chaque $\mathbf{k} \in \Omega^*$, $H(\mathbf{k})$ n'a que du spectre purement discret. Désignons par $\{E_j(\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ l'ensemble des valeurs propres comptées avec leur multiplicité et *indexées dans un ordre croissant*. Les fonctions propres correspondantes $\{u_j(\cdot\,; \mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ forment un système orthonormal complet dans $L^2(\mathbb{T}^3)$ et satisfont :

$$H(\mathbf{k})u_j(\cdot\,; \mathbf{k}) = E_j(\mathbf{k})u_j(\cdot\,; \mathbf{k}), \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$

Avec ce choix d'indexation (ordre croissant), la théorie des perturbations standarde assure que chaque fonction d'énergie de Bloch $\mathbf{k} \mapsto E_j(\mathbf{k})$ est continue et $2\pi\mathbb{Z}^3$-périodique.

Lorsque $\omega = 0$, (6.10) peut être réécrite uniquement en termes des fonctions d'énergie de Bloch. L'expression ci-dessous (dont la preuve est donnée dans l'annexe de cette section) repose sur la première assertion du Théorème 6.32 (cf. appendice de ce chapitre) :

Proposition 6.11. *Soient $\beta > 0$ et $\mu \in \mathbb{R}$. Désignons par Ω^* la première zone de Brillouin du réseau dual $2\pi\mathbb{Z}^3$. Alors :*

$$\rho_\infty(\beta, e^{\beta\mu}, \omega = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; E_j(\mathbf{k})) \tag{6.12}$$

Rappelons que lorsque la densité de particules $\rho_0 > 0$ est prise comme paramètre extérieur, la relation liant la fugacité à la densité peut être inversée puisque pour tout $\beta > 0$, $\rho_\infty(\beta, \cdot\,, \omega = 0)$ vue comme une fonction de z est strictement croissante sur $(0, +\infty)$ et définie un $\mathcal{C}^\infty$-difféomorphisme de $(0, +\infty)$ dans $(0, +\infty)$ (voir appendice 1, chapitre 5). Ainsi il existe un unique $z_\infty(\beta, \rho_0) \in (0, +\infty)$ et par conséquent un unique $\mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ satisfaisant $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty(\beta,\rho_0)}, \omega = 0) = \rho_0$.

A partir de (6.12) et (6.11) (avec $\omega = 0$), lorsque la température $T \to 0$, on a l'identité suivante (la preuve se trouve dans l'annexe de cette section) :

Proposition 6.12. *Soient $E_0 := \inf \sigma(H_\infty(0))$ et $\mu \geq E_0$ fixé. Alors :*

$$\lim_{\beta\to+\infty} \rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mu]}(E_j(\mathbf{k})) = n_\infty(\mu) \tag{6.13}$$

où $\chi_{[E_0,\mu]}(\cdot)$ désigne la fonction caractéristique de l'intervalle $[E_0, \mu]$.

Ainsi (6.13) permet d'exprimer $n_\infty(\cdot)$ uniquement en termes des fonctions d'énergie de Bloch. A partir de cette relation, on voit directement que $n_\infty(\cdot)$ est positive, non-décroissante et continue (en μ) en raison de la continuité des fonctions d'énergie de Bloch. De plus, cette fonction est constante par morceaux quand μ appartient à un gap spectral. Enfin, on rappelle qu'elle possède le comportement asymptotique (voir par ex. [62]) :

$$n_\infty(\lambda) \sim \lambda^{\frac{3}{2}} \quad \text{lorsque } \lambda \to +\infty \tag{6.14}$$

La preuve du Théorème 6.1 repose sur ce dernier résultat concernant le comportement de n_∞ au voisinage des bords d'un gap (la preuve est dans l'annexe de cette section) :

Lemme 6.13. *Soit $\rho_0 > 0$ fixé. Supposons qu'il existe $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $n_\infty(E) = \rho_0$ pour tout E satisfaisant $\max \mathcal{E}_N \leq E \leq \min \mathcal{E}_{N+1}$. Posons $a_N := \max \mathcal{E}_N$ et $b_N := \min \mathcal{E}_{N+1}$. Supposons que le gap soit ouvert, i.e. $a_N < b_N$. Alors pour $\delta > 0$ suffisamment petit, il existe une constante $c = c_\delta > 0$ telle que :*

$$\begin{aligned} n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda) &\geq c(a_N - \lambda)^3 \quad \textit{lorsque} \quad \lambda \in [a_N - \delta, a_N] \\ n_\infty(\lambda) - n_\infty(b_N) &\geq c(\lambda - b_N)^3 \quad \textit{lorsque} \quad \lambda \in [b_N, b_N + \delta] \end{aligned} \tag{6.15}$$

2.2 Preuve du Théorème 6.1 : le cas semi-conducteur (SC)

On se place dans la situation où il existe $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $n_\infty(E) = \rho_0 > 0$ pour tout E satisfaisant $\max \mathcal{E}_N \leq E \leq \min \mathcal{E}_{N+1}$. Posons $a_N := \max \mathcal{E}_N$ et $b_N := \min \mathcal{E}_{N+1}$.
Soit $\mu(\beta) := \mu_\infty(\beta, \rho_0)$ l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \rho_0$.

On commence avec ce premier lemme :

Lemme 6.14.

$$a_N \leq \mu_1 := \liminf_{\beta\to+\infty} \mu(\beta) \leq \limsup_{\beta\to+\infty} \mu(\beta) =: \mu_2 \leq b_N$$

Preuve Lemme 6.14.
On prouve par contraposé l'inégalité $a_N \leq \mu_1 := \liminf_{\beta\to+\infty} \mu(\beta)$.
On suppose que $\mu_1 < a_N$. Alors il existe $\epsilon > 0$ et une suite divergente $\{\beta_n\}_{n\geq 1}$ telle que :

$$\lim_{n\to\infty} \mu(\beta_n) = \mu_1 \quad \text{et} \quad \mu(\beta_n) \leq a_N - \epsilon \quad \forall\, n \geq 1$$

Puisque $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0)$, vue comme une fonction de μ, est une fonction croissante :

$$\rho_0 = \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n \mu(\beta_n)}, \omega = 0) \leq \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n (a_N - \epsilon)}, \omega = 0)$$

En passant à la limite $n \to \infty$ dans l'inégalité ci-dessus, (6.13) implique :

$$\rho_0 \leq n_\infty(a_N - \epsilon) < n_\infty(a_N) = \rho_0$$

où dans la seconde inégalité, on a utilisé (6.15). On arrive ainsi à une contradiction.
L'autre inégalité ($\mu_2 := \limsup_{\beta\to+\infty} \mu(\beta) \leq b_N$) se démontre par une méthode similaire.

■

Remarquons maintenant que si $a_N = b_N$, la preuve de (6.2) est finie. On peut alors supposer que $a_N < b_N$, c'est-à-dire que le gap est ouvert.
Avec les mêmes notations que le lemme ci-dessus, prouvons ensuite les inégalités strictes :

Lemme 6.15.

$$a_N < \mu_1 \leq \mu_2 < b_N$$

Preuve Lemme 6.15.
Nous montrons seulement par contraposé l'inégalité $\mu_1 > a_N$, l'autre inégalité ($\mu_2 < b_N$) se déduira par une méthode similaire. Supposons que $\mu_1 = a_N$ et posons $\epsilon := b_N - a_N > 0$. Il existe une suite $\{\beta_n\}_{n\geq 1}$ avec $\beta_n \to +\infty$ et un entier $M_\epsilon \geq 1$ assez grand tels que :

$$a_N - \frac{\epsilon}{4} \leq \mu(\beta_n) \leq a_N + \frac{\epsilon}{4} \quad \text{lorsque} \quad n \geq M_\epsilon$$

Séparons la suite construite ci-dessus en deux sous-suites : l'une dont tous les termes se trouvent "à gauche" de a_N, et l'autre dont tous les termes se trouvent "à droite" de a_N. Nous allons traiter séparément ces deux situations.

Situation 1
Considérons la situation dans laquelle il existe une sous-suite $\{\mu(\beta_{n_k})\}_{k\geq 1}$ obéissant à :

$$\lim_{k\to\infty} \mu(\beta_{n_k}) = a_N \quad \text{et} \quad a_N \leq \mu(\beta_{n_k}) \leq a_N + \frac{\epsilon}{4} \quad \text{lorsque} \quad k \geq 1 \tag{6.16}$$

Utilisons l'identité (6.11) (avec $\omega = 0$) dans laquelle on introduit $\mu(\beta_{n_k})$. On obtient :

$$\rho_0 = n_\infty(a_N) = -\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \lambda}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) n_\infty(\lambda) - n_\infty(b_N)\mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); b_N) +$$
$$+ n_\infty(a_N)\mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); a_N) - \int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \lambda}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) n_\infty(\lambda)$$

où on a utilisé le fait que $n_\infty(E) = \rho_0$ pour tout $E \in [a_N, b_N]$. Ensuite :

$$\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \lambda}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda)\{n_\infty(\lambda) - n_\infty(a_N)\} =$$
$$\int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \lambda}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda)\{n_\infty(b_N) - n_\infty(\lambda)\} \tag{6.17}$$

où on a utilisé que $\lim_{\lambda\to-\infty} \mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) = 1$ et $\mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) \leq ce^{-\lambda\beta_{n_k}}$ pour λ assez grand. Dans le membre de gauche de (6.17), on introduit l'expression :

$$\partial_\lambda \mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) = -\beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda - \mu(\beta_{n_k}))}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))} + 1)^2} = -\beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(a_N - \mu(\beta_{n_k}))}\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda - a_N)}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))} + 1)^2} \tag{6.18}$$

alors que dans le membre de droite de (6.17) on utilise l'autre expression :

$$\partial_\lambda \mathfrak{f}_{FD}(\beta_{n_k}, \mu(\beta_{n_k}); \lambda) = -\beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda - \mu(\beta_{n_k}))}}{(1 + \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2} = -\beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(b_N - \mu(\beta_{n_k}))}\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda - b_N)}}{(1 + \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2} \tag{6.19}$$

Par conséquent, l'identité (6.17) peut se réécrire comme :

$$\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda - a_N)}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}+1)^2}\{n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda)\}$$
$$= \mathrm{e}^{\beta_{n_k}\{2\mu(\beta_{n_k})-(a_N+b_N)\}} \int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2}\{n_\infty(\lambda) - n_\infty(b_N)\} \quad (6.20)$$

L'idée est de montrer que l'égalité (6.20) ne peut être valable si k est suffisamment grand. Nous allons montrer qu'une borne inférieure pour le membre de gauche de (6.20) devient plus grande qu'une borne supérieure pour le membre de droite de (6.20) pour k assez grand. Soit $\delta > 0$ assez petit. Utilisant (6.15) dans le membre de gauche de (6.20) :

$$\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda - a_N)}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}+1)^2}\{n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda)\} \geq \frac{c}{4}\int_{a_N-\delta}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(a_N-\lambda)}(a_N-\lambda)^3$$

Après un changement de variable :

$$\int_{a_N-\delta}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(a_N-\lambda)}(a_N-\lambda)^3 = \frac{1}{\beta_{n_k}^4}\int_0^{\delta\beta_{n_k}} \mathrm{d}t \, t^3\mathrm{e}^{-t}$$

Soit $k_0 \geq 1$ suffisamment grand tel que $\forall\, k \geq k_0$, $\delta\beta_{n_k} \geq 2$. A partir de ces estimations :

$$\int_0^1 \mathrm{d}t \, t^3\mathrm{e}^{-t} \geq \frac{\mathrm{e}^{-1}}{4}, \quad \int_1^{\delta\beta_{n_k}} \mathrm{d}t \, t^3\mathrm{e}^{-t} \geq \mathrm{e}^{-1}(1-\mathrm{e}^{-(\delta\beta_{n_k}-1)}) \geq \mathrm{e}^{-1}\frac{\delta\beta_{n_k}-1}{\delta\beta_{n_k}} \geq \frac{\mathrm{e}^{-1}}{\delta}\frac{1}{\beta_{n_k}}$$

on déduit l'existence d'une autre constante $c_1 > 0$ telle que :

$$\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda - a_N)}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}+1)^2}\{n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda)\} \geq \frac{c_1}{\beta_{n_k}^5} \quad \forall\, k \geq k_0 \quad (6.21)$$

Montrons que le membre de droite de (6.20) décroît exponentiellement en β_{n_k}. La condition $\mu(\beta_{n_k}) \leq a_N + \epsilon/4$ implique que $2\mu(\beta_{n_k}) - a_N - b_N \leq -\epsilon/2$ et $\mu(\beta_{n_k}) \leq b_N$. Ainsi :

$$\mathrm{e}^{\beta_{n_k}\{2\mu(\beta_{n_k})-(a_N+b_N)\}} \int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2}\{n_\infty(\lambda) - n_\infty(b_N)\}$$
$$\leq \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\epsilon/2}\int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)} n_\infty(\lambda)$$

Ensuite, utilisons (6.14) : il existe une constante $c > 0$ telle que $\lim_{\lambda\to+\infty} \lambda^{-\frac{3}{2}} n_\infty(\lambda) = c$. Soit $\eta > 0$. Alors il existe $\lambda_0 > 2b_N$ tel que pour tout $\lambda \geq \lambda_0$, $n_\infty(\lambda) \leq (1+\eta)c\lambda^{\frac{3}{2}}$. D'une part pour tout $k \geq 1$,

$$\int_{b_N}^{\lambda_0} \mathrm{d}\lambda \, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)} n_\infty(\lambda) \leq n_\infty(\lambda_0)\frac{1}{\beta_{n_k}}(1-\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda_0-b_N)}) \leq \frac{n_\infty(\lambda_0)}{\beta_{n_k}}$$

D'autre part, puisque $\lambda \mapsto \lambda^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\beta_{n_k}}{2}\lambda}$ atteint sont maximum en $\lambda = \frac{3}{\beta_{n_k}}$, il existe une autre constante $c > 0$ telle que pour tout $k \geq 1$:

$$\int_{\lambda_0}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda \, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)} n_\infty(\lambda) \leq c\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\beta_{n_k}}{2}(\lambda_0-2b_N)}}{\beta_{n_k}^{\frac{5}{2}}} \leq \frac{c}{\beta_{n_k}^{\frac{5}{2}}}$$

En réunissant ces estimations, on déduit qu'il existe une constante $c_2 > 0$ telle que $\forall\, k \geq 1$,

$$\mathrm{e}^{\beta_{n_k}\{2\mu(\beta_{n_k})-(a_N+b_N)\}} \int_{b_N}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda\, \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2}\{n_\infty(\lambda)-n_\infty(b_N)\} \leq c_2 \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\frac{\epsilon}{4}}}{\beta_{n_k}^5} \tag{6.22}$$

Ainsi pour k suffisamment grand, (6.21) devient plus grand que (6.22).
En conclusion, nous ne pouvons pas trouver de sous-suite qui obéisse à (6.16).

<u>Situation 2</u>
Maintenant considérons la situation dans laquelle :

$$\lim_{k\to\infty} \mu(\beta_{n_k}) = a_N \quad \text{et} \quad a_N - \epsilon/4 \leq \mu(\beta_{n_k}) \leq a_N \quad \text{lorsque} \quad k \geq 1 \tag{6.23}$$

En utilisant (6.18) et (6.19), on a l'identité :

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda\, \beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}+1)^2}\{n_\infty(a_N)-n_\infty(\lambda)\} \\ = \int_{b_N}^{\infty} \mathrm{d}\lambda\, \beta_{n_k} \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(b_N-\mu(\beta_{n_k}))} \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2}\{n_\infty(\lambda)-n_\infty(b_N)\}\end{aligned} \tag{6.24}$$

Nous allons encore montrer que l'identité (6.24) ne peut être valable pour k assez large.
D'une part, compte-tenu de (6.23) et via (6.15), il existe une constante $c_1^{'} > 0$ telle que :

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{a_N} \mathrm{d}\lambda\, \beta_{n_k} \frac{\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}}{(\mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))}+1)^2}\{n_\infty(a_N)-n_\infty(\lambda)\} \geq \\ \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{a_N-\frac{\epsilon}{4}} \mathrm{d}\lambda\, \beta_{n_k} \mathrm{e}^{\beta_{n_k}(\lambda-a_N)}\{n_\infty(a_N)-n_\infty(\lambda)\} \geq c_1^{'}\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\frac{\epsilon}{4}} \quad \forall\, k \geq 1\end{aligned}$$

D'autre part, compte-tenu de (6.23),

$$\begin{aligned}\int_{b_N}^{\infty} \mathrm{d}\lambda\, \beta_{n_k} \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(b_N-\mu(\beta_{n_k}))} \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)}}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-\mu(\beta_{n_k}))})^2}\{n_\infty(\lambda)-n_\infty(b_N)\} \\ \leq \beta_{n_k}\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\epsilon}\int_{b_N}^{\infty} \mathrm{d}\lambda\, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)} n_\infty(\lambda)\end{aligned}$$

puis en utilisant les mêmes arguments que précédemment, il existe $c_2^{'} > 0$ telle que :

$$\beta_{n_k}\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\epsilon}\int_{b_N}^{\infty} \mathrm{d}\lambda\, \mathrm{e}^{-\beta_{n_k}(\lambda-b_N)} n_\infty(\lambda) \leq c_2^{'}\frac{\mathrm{e}^{-\beta_{n_k}\frac{\epsilon}{2}}}{\beta_{n_k}^{\frac{3}{2}}} \quad \forall\, k \geq 1$$

Ainsi un majorant du membre de droite de (6.24) devient plus petit qu'un minorant du membre de gauche de (6.24). En conclusion, nous ne pouvons pas trouver de sous-suite qui obéisse à (6.23). Cela conclut la preuve de l'inégalité $a_N < \mu_1$.
L'inégalité $\mu_2 = \limsup_{\beta\to+\infty} \mu_\infty(\beta) < b_N$ se démontre avec une méthode similaire.

■

La dernière étape dans la preuve du cas semi-conducteur est contenue dans le lemme suivant. Avec les mêmes notations que dans les deux lemmes au-dessus :

Lemme 6.16.

$$\frac{a_N + b_N}{2} \leq \mu_1 \leq \mu_2 \leq \frac{a_N + b_N}{2}$$

Preuve Lemme 6.16.
Supposons que $a_N < \mu_1 < (a_N + b_N)/2$. A partir des deux lemmes précédents, il existe $\epsilon > 0$ suffisamment petit tel que $a_N < \mu_1 \leq (a_N + b_N)/2 - \epsilon$.
Il existe alors une suite divergente $\{\beta_n\}_{n\geq 1}$ telle que :

$$\lim_{n\to\infty} \mu(\beta_n) \to \mu_1 \quad \text{et} \quad a_N < \mu(\beta_n) \leq \frac{(a_N + b_N)}{2} - \frac{\epsilon}{2} \quad \forall\, n \geq 1$$

Il en résulte que $2\mu(\beta_n) - a_N - b_N \leq -\epsilon/2$. Ainsi, on peut répéter les arguments utilisés précédemment dans la "Situation 1" et montrer que le membre de gauche de (6.20) va converger plus lentement vers 0 que le membre de droite de (6.20).
On conclut que $(a_N + b_N)/2 \leq \mu_1$.
Supposons enfin que $(a_N + b_N)/2 < \mu_2 < b_N$. Dans ce cas, on peut répéter les arguments utilisés précédemment dans la "Situation 2" et prouver que le membre de gauche de (6.24) va converger plus lentement vers 0 que le membre de droite de (6.24).
On conclut que $\mu_2 \leq (a_N + b_N)/2$.

■

2.3 Preuve du Théorème 6.1 : le cas métallique (M)

Considérons la situation où il existe une unique solution E_M à l'équation $n_\infty(E) = \rho_0$, et cette solution se trouve à l'intérieur d'une bande de Bloch. En d'autres termes, il existe $N \in \mathbb{N}^*$ éventuellement non unique tel que $\min \mathcal{E}_N < E_M < \max \mathcal{E}_N$. Notons que la densité d'états intégrée $n_\infty(\cdot)$ est une fonction strictement croissante sur $[\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N]$.

Soit $\mu(\beta) := \mu_\infty(\beta, \rho_0)$ l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, e^{\beta\mu(\beta)}, \omega = 0) = \rho_0$.
Montrons que :

$$E_M \leq \mu_1 := \liminf_{\beta\to+\infty} \mu(\beta) \leq \limsup_{\beta\to+\infty} \mu(\beta) := \mu_2 \leq E_M$$

ce qui achèvera la preuve. On commence par montrer l'inégalité de gauche par contraposé.
Supposons que $\mu_1 < E_M$. Alors il existe $\epsilon > 0$ et une suite divergente $\{\beta_n\}_{n\geq 1}$ tels que :

$$\lim_{n\to\infty} \mu(\beta_n) = \mu_1 \quad \text{et} \quad \mu(\beta_n) \leq E_M - \epsilon \quad \forall\, n \geq 1$$

Puisque $\rho_\infty(\beta, e^{\beta\mu}, \omega = 0)$, vue comme une fonction de μ, est une fonction croissante :

$$n_\infty(E_M) = \rho_0 = \lim_{n\to\infty} \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n\mu(\beta_n)}, 0) \leq \lim_{n\to\infty} \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n(E_M-\epsilon)}, 0) = n_\infty(E_M - \epsilon)$$

où dans la dernière égalité, on a utilisé l'identité (6.13).
Mais l'inégalité $n_\infty(E_M) \leq n_\infty(E_M - \epsilon)$ est en contradiction avec le fait que $n_\infty(\cdot)$ soit une fonction strictement croissante au voisinage de E_M. Par conséquent $E_M \leq \mu_1$.
Supposons que $\mu_2 > E_M$. Alors il existe $\epsilon > 0$ et une suite divergente $\{\beta_n\}_{n\geq 1}$ tels que :

$$\lim_{n\to\infty} \mu(\beta_n) = \mu_2 \quad \text{et} \quad E_M + \epsilon \leq \mu(\beta_n) \quad \forall\, n \geq 1$$

En utilisant à nouveau que $\rho_\infty(\beta, e^{\beta\mu}, \omega = 0)$ est une fonction croissante de la variable μ :

$$n_\infty(E_M + \epsilon) = \lim_{n\to\infty} \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n(E_M+\epsilon)}, 0) \leq \lim_{n\to\infty} \rho_\infty(\beta_n, e^{\beta_n\mu(\beta_n)}, 0) = \rho_0 = n_\infty(E_M)$$

où dans la première égalité, on a utilisé à nouveau l'identité (6.13).
Mais $n_\infty(E_M + \epsilon) \leq n_\infty(E_M)$ est en contradiction avec le fait que $n_\infty(\cdot)$ soit une fonction strictement croissante au voisinage de E_M. Par conséquent, $\mu_2 \leq E_M$.

■

2.4 Annexe : preuves des résultats intermédiaires

Preuve Proposition 6.11.
La preuve repose essentiellement sur l'assertion (i) du Théorème 6.32 établi dans la section 6 de ce chapitre. Remarquons que puisque $\mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \cdot)$ est exponentiellement décroissante sur le contour γ pour $\Re\xi > 0$ assez large, le résultat (6.81) concernant la trace par unité de volume $\mathcal{J}_0^m(\beta, \mu)$ définie en (6.77) peut être réutilisé en remplaçant $\mathfrak{f}(\beta, \mu; \cdot)$ par $\mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \cdot)$. Ainsi, pour tout $\beta > 0$ et $\mu \in \mathbb{R}$, (6.10) peut être réécrit comme :

$$\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \left(\frac{-1}{2i\pi}\right) \int_\gamma \mathrm{d}\xi \, \frac{\mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi)}{(E_j(\mathbf{k}) - \xi)}$$

Il ne reste plus qu'à appliquer le théorème des résidus :

$$\left(\frac{-1}{2i\pi}\right) \int_\gamma \mathrm{d}\xi \, \frac{\mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi)}{(E_j(\mathbf{k}) - \xi)} = \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; E_j(\mathbf{k})), \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$

■

Preuve Proposition 6.12.
Soient $E_0 := \inf \sigma(H_\infty(0))$ et $\mu \geq E_0$ fixé. Utilisons (6.12) pour prouver les identités (6.13). Comme pour tout $\xi \in [E_0, +\infty) \setminus \{\mu\}$, on a le résultat de convergence simple suivant :

$$\lim_{\beta\to+\infty} \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi) = \chi_{[E_0,\mu]}(\xi)$$

où $\chi_{[E_0,\mu]}(\cdot)$ désigne la fonction caractéristique de l'intervalle $[E_0, \mu]$, alors par le théorème de convergence dominée, on obtient :

$$\lim_{\beta\to+\infty} \rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \, \chi_{[E_0,\mu]}(E_j(\mathbf{k}))$$

Il reste à prouver la seconde identité. Pour cela, on va utiliser un résultat de [43] :

$$\forall\, f \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}), \quad \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \, f(E_j(\mathbf{k})) = -\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}t \, \partial_t f(t) n_\infty(t)$$

En prenant une suite de fonctions faiblement convergente vérifiant $f_n(x) \to \chi_{[E_0,\mu]}(x)$ lorsque $n \to \infty$, en vertu de l'identité ci-dessus, on obtient :

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \, f_n(E_j(\mathbf{k})) = n_\infty(\mu)$$

■

Preuve Lemme 6.13.
Soient $a_N := \max \mathcal{E}_N$ et $b_N := \min \mathcal{E}_{N+1}$. On suppose que le gap est ouvert : $a_N < b_N$.
On prouve seulement (6.15) puisque l'autre inégalité se démontre de la même manière.
Remarquons d'abord que pour λ suffisamment proche de a_N vérifiant $\lambda \leq a_N$, la seconde identité dans (6.13) permet d'écrire :

$$n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\{\, \mathbf{k} \in \Omega^* \,:\, \lambda \leq E_N(\mathbf{k}) \leq a_N \,\}} \mathrm{d}\mathbf{k}$$

Donnons maintenant la stratégie. Compte-tenu du fait que $a_N = \max_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_N(\mathbf{k})$, le maximum est atteint en un point (éventuellement non unique) $\mathbf{k}_0$, i.e. $a_N = E_N(\mathbf{k}_0)$. a_N est une valeur propre discrète, de multiplicité finie $1 \leq M \leq N$, de la fibre $H(\mathbf{k}_0) = \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k}_0)^2 + V$. En particulier a_N est isolée du reste du spectre puisqu'on a supposé que $a_N < b_N \leq E_{N+1}(\mathbf{k}_0)$. Pour $\mathbf{k}$ dans un petit voisinage de $\mathbf{k}_0$, la valeur propre a_N va se séparer au plus en M valeurs propres différentes.
Choisissons $\delta > 0$ suffisamment petit de telle sorte que :

$$\sigma(H(\mathbf{k}_0)) \cap [a_N - \delta, a_N + \delta] = \{E_N(\mathbf{k}_0)\}$$

On utilise la théorie des perturbations analytiques afin de contrôler la localisation du spectre de $H(\mathbf{k})$ lorsque $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ est petit (on suppose sans perte de généralité que $\mathbf{k}_0$ se trouve dans l'intérieur de Ω^*). Posons :

$$W(\mathbf{k}) := H(\mathbf{k}) - H(\mathbf{k}_0) = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot (-i\nabla + \mathbf{k}_0) + \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{2}$$

Puisque $(-i\nabla + \mathbf{k}_0)$ est $H(\mathbf{k}_0)$ -borné avec borne relative nulle, on peut alors trouver une constante $c > 0$ telle que (ici $\| \cdot \|$ désigne la norme opérateur sur $L^2(\Omega)$) :

$$\|W(\mathbf{k})(H(\mathbf{k}_0) - i)^{-1}\| \leq c|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|, \quad |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \leq 1$$

Considérons maintenant un cercle $\mathcal{C}$ de centre a_N et de rayon $r := (a_N - \lambda)/2 \leq \delta/2$.
En vertu de la première équation résolvante, pour tout $z \in \mathcal{C}$:

$$(H(\mathbf{k}_0) - z)^{-1} = (H(\mathbf{k}_0) - i)^{-1} + (z - i)(H(\mathbf{k}_0) - i)^{-1}(H(\mathbf{k}_0) - z)^{-1}$$

et en utilisant que pour tout $z \in \mathcal{C}$, $\|(H(\mathbf{k}_0) - z)^{-1}\| = 2/(a_N - \lambda)$; on peut trouver alors une autre constante $c_\delta > 0$ telle que :

$$\sup_{z\in\mathcal{C}} \|W(\mathbf{k})(H(\mathbf{k}_0) - z)^{-1}\| \leq c_\delta \frac{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|}{(a_N - \lambda)} \quad |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \leq 1$$

et par suite :

$$\sup_{z\in\mathcal{C}} \|W(\mathbf{k})(H(\mathbf{k}_0) - z)^{-1}\| \leq \epsilon c_\delta \quad \text{lorsque} \quad |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \leq (a_N - \lambda)\epsilon$$

La théorie des perturbations analytiques assure que si ϵ est choisi suffisamment petit, $H(\mathbf{k})$ aura exactement M valeurs propres à l'intérieur du cercle $\mathcal{C}$. Et pour une telle valeur de ϵ, pour tout $\mathbf{k}$ tel que $|\mathbf{k}-\mathbf{k}_0| \leq \epsilon(a_N-\lambda)$, $\sigma(H(\mathbf{k}))\cap[a_N-\delta, a_N] \subseteq [(a_N+\lambda)/2, a_N] \subset [\lambda, a_N]$. En particulier, $\lambda < E_N(\mathbf{k}) \leq a_N$ pour de tels $\mathbf{k}$.
Au final, par passage en coordonnées sphériques, on obtient :

$$n_\infty(a_N) - n_\infty(\lambda) \geq \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}_0| \leq \epsilon(a_N - \lambda)} \mathrm{d}\mathbf{k} \geq c(a_N - \lambda)^3$$

■

3 Susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul, à température positive et à densité fixées

L'objectif de cette section est d'établir une expression pour la susceptibilité "orbitale" (par unité de volume) en champ magnétique nul, à température positive et à densité fixées, ne faisant intervenir *explicitement* que les fonctions d'énergie de Bloch $\mathbf{k} \mapsto E_j(\mathbf{k})$ et leurs fonctions propres associées de la fibre $H(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V$.
Cette expression est indispensable pour la preuve du Théorème 6.4 puisque c'est à partir de celle-ci que sera prise la limite $\beta \to +\infty$ (cf. section 4).

3.1 Expression générale

Le point de départ est l'expression de la limite thermodynamique de la susceptibilité magnétique (contribution "orbitale" seulement) grand-canonique établie au chapitre 5. Rappelons cette expression en y introduisant de nouvelles notations.

Soient $\beta > 0$ et $z := \mathrm{e}^{\beta\mu} \in (0, +\infty)$ les paramètres extérieurs fixés. Soit γ le contour orienté positivement défini en (6.9), contournant la demi-droite $[E_0, +\infty)$ et inclus dans le domaine d'holomorphie $\mathfrak{C} := \{\xi \in \mathbb{C} : \Im\xi \in (-\pi/\beta, \pi/\beta)\}$ de $\xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta, z; \xi) := \ln(1+z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$.
Pour $\beta > 0$, $z \in (0, +\infty)$ et $\omega \in \mathbb{R}$, la limite thermodynamique de la pression grand-canonique du gaz d'électrons de Bloch est définie par (voir (5.8)) :

$$P_\infty(\beta, z, \omega) := \frac{1}{\beta|\Omega|}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\left\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, z; \xi) R_\infty(\omega, \xi)\right\}$$

où Ω est le cube unité centré en l'origine des coordonnées (V est supposé $\mathbb{Z}^3$-périodique).

En vertu du fait que $P_\infty(\beta, z, \cdot\,)$ soit une fonction lisse de la variable ω (voir Corollaire 5.4), la limite thermodynamique de la susceptibilité grand-canonique s'écrit comme :

$$\begin{aligned}\mathcal{X}^2_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega) :&= \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 P_\infty}{\partial\omega^2}(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega)\\ &= \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{2}{\beta|\Omega|}\Big\{\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,1}(\beta, \mu, \omega)\big\} - \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta, \mu, \omega)\big\}\Big\}\end{aligned}$$

où $\mathcal{W}_{\infty,1}(\beta, \mu, \omega)$ et $\mathcal{W}_{\infty,2}(\beta, \mu, \omega)$ sont les opérateurs localement de classe trace dont les noyaux sont jointement continus sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ (voir Remarque 5.11), définis par :

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{\infty,1}(\beta, \mu, \omega) &:= \frac{i}{2\pi}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi) R_\infty(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi) T_{1,\infty}(\omega, \xi)\\ \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta, \mu, \omega) &:= \frac{i}{2\pi}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi) R_\infty(\omega, \xi) T_{2,\infty}(\omega, \xi)\end{aligned}$$

$T_{1,\infty}(\omega, \xi)$ et $T_{2,\infty}(\omega, \xi)$ sont les opérateurs générés par les noyaux définis en (5.4) et (5.5).

Supposons maintenant que le champ magnétique soit nul ($\omega = 0$) et que la densité de particules $\rho_0 > 0$ soit prise comme paramètre fixé. Dans ce cas, la susceptibilité "orbitale" (par unité de volume) en champ magnétique nul, à température positive et à densité fixées, est donnée par (voir appendice 1, chapitre 5) :

$$\begin{aligned}\mathcal{X}(\beta, \rho_0) &:= \mathcal{X}^2_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu_\infty}, \omega = 0)\\ &= \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{2}{\beta|\Omega|}\Big\{\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,1}(\beta, \mu_\infty, 0)\big\} - \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta, \mu_\infty, 0)\big\}\Big\} \qquad (6.25)\end{aligned}$$

où $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ est l'unique solution de l'équation $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, \omega = 0) = \rho_0$.

Afin de formuler le résultat important de cette section, rappelons quelques notations. Pour chaque $\mathbf{k} \in \Omega^*$, soient $\{E_j(\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ l'ensemble des valeurs propres (comptées avec leur multiplicité et *indexées dans un ordre croissant*) et $\{u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ l'ensemble des fonctions propres associées de la fibre $H(\mathbf{k}) := \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V$ agissant dans $L^2(\mathbb{T}^3)$.

Pour tout $\alpha \in \{1, 2, 3\}$, $i, j \in \mathbb{N}^*$ et $\mathbf{k} \in \Omega^*$, introduisons la quantité :

$$\hat{\pi}_{i,j}(\alpha; \mathbf{k}) := \int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\, \overline{u_i(\underline{\mathbf{x}}; \mathbf{k})}[(p_\alpha + k_\alpha)u_j(\underline{\mathbf{x}}; \mathbf{k})] = \langle u_i(\cdot\,; \mathbf{k}), (p_\alpha + k_\alpha)u_j(\cdot\,; \mathbf{k})\rangle \tag{6.26}$$

où $p_\alpha := (-i\nabla) \cdot \mathbf{e}_\alpha$ sont les composantes de l'opérateur impulsion défini dans $L^2(\mathbb{T}^3)$.

La susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul (6.25) peut encore s'écrire :

<u>Théorème</u> 6.17. *Soient $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$ fixés. Soit $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ l'unique solution de $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, 0) = \rho_0$. Alors pour chaque $j_1 \in \mathbb{N}^*$, il existe quatre familles de fonctions (à valeurs complexes) $\mathfrak{c}_{j_1,l}(\cdot\,)$, avec $l \in \{0, 1, 2, 3\}$, définies sur Ω^* en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles que l'intégrande ci-dessous soit borné et continu sur Ω^* :*

$$\mathcal{X}(\beta, \rho_0) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{2\beta}\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{j_1=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{l=0}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k}) \tag{6.27}$$

avec la convention $(\partial_\xi^0 \mathfrak{f})(\beta, \mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k})) = \mathfrak{f}(\beta, \mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k}))$. Pour tout $j_1 \in \mathbb{N}^*$, les fonctions $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{c}_{j_1,3}(\mathbf{k})$ et $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{c}_{j_1,2}(\mathbf{k})$ sont définies respectivement par :

$$\begin{aligned}\mathfrak{c}_{j_1,3}(\mathbf{k}) := \frac{1}{3!}\Bigg\{ &|\hat{\pi}_{j_1,j_1}(1; \mathbf{k})|^2 \Bigg(1 + \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2; \mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})}\Bigg) + \\ &+ |\hat{\pi}_{j_1,j_1}(2; \mathbf{k})|^2 \Bigg(1 + \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1; \mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})}\Bigg) + \\ &- \hat{\pi}_{j_1,j_1}(1; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_1,j_1}(2; \mathbf{k}) \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{2\Re\big(\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_1}(1; \mathbf{k})\big)}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})}\Bigg\}\end{aligned} \tag{6.28}$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{c}_{j_1,2}(\mathbf{k}) := -\frac{1}{2}\Bigg\{ &\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1; \mathbf{k})|^2 + |\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2; \mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})} - 1 + \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{\mathcal{C}_{j_2,j_1,j_1,j_1}(\mathbf{k}) - \mathcal{C}_{j_1,j_1,j_2,j_1}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k}))^2} + \\ &+ \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq j_1}}^{\infty} \frac{\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_2,j_3}(\mathbf{k}) + \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_1,j_3}(\mathbf{k}) + \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_1}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k}))(E_{j_3}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k}))}\Bigg\}\end{aligned} \tag{6.29}$$

avec,

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k}) := &\big\{\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_3}(2; \mathbf{k}) - \hat{\pi}_{j_1,j_2}(2; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_3}(1; \mathbf{k})\big\} \cdot \\ &\cdot \big\{\hat{\pi}_{j_3,j_4}(2; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_4,j_1}(1; \mathbf{k}) - \hat{\pi}_{j_3,j_4}(1; \mathbf{k})\hat{\pi}_{j_4,j_1}(2; \mathbf{k})\big\}\end{aligned} \tag{6.30}$$

Remarque 6.18. Comme annoncé, la particularité de l'expression (6.27) réside dans le fait que chaque fonction $c_{j_1,l}(\cdot)$, $j_1 \in \mathbb{N}^*$ et $l \in \{0,1,2,3\}$, peut s'écrire explicitement en termes des fonctions de Bloch et de leurs fonctions propres associées. Comme on va le voir ci-dessous, pour tout $j_1 \in \mathbb{N}^*$, les fonctions $\mathfrak{c}_{j_1,l}(\cdot)$, $l \in \{0,1\}$, peuvent être identifiées mais leur expression explicite n'est pas nécessaire pour la preuve du Théorème 6.4.

Remarque 6.19. Notons que l'expression (6.27) fait intervenir indirectement la fonction distribution de Fermi-Dirac et ses dérivées partielles au plus d'ordre 2. Cela s'avèrera d'une grande importance quand on prendra la limite $\beta \to +\infty$ dans la section 4.

Le reste de cette section est consacré à la preuve du Théorème 6.17.

3.2 Preuve du Théorème 6.17

Tous les résultats intermédiaires ont leur preuve dans l'annexe de cette section.

La première étape consiste à écrire les traces (locales) apparaissant dans (6.25) d'une manière adéquate pour l'application de la décomposition de Bloch-Floquet :

Lemme 6.20. *Soient $\beta > 0$, $\mu \in \mathbb{R}$ et $\rho_0 > 0$ fixés. Soient $p_\alpha := (-i\nabla)\cdot \mathbf{e}_\alpha$ avec $\alpha \in \{1,2,3\}$, les composantes de l'opérateur impulsion défini dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Alors :*

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,1}(\beta,\mu,0)\big\} &= \frac{1}{4}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\cdot \\ &\cdot \big[R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi)\big\{p_2R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi) - p_1R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi)\big\}+ \\ &+ R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi)\big\{p_1R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi) - p_2R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi)\big\}\big]\Big\}\end{aligned} \tag{6.31}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta,\mu,0)\big\} &= -\frac{1}{4}\frac{i}{2\pi}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\cdot \\ &\cdot R_\infty(0,\xi)R_\infty(0,\xi)\big[p_2R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi) + p_1R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi) - R_\infty(0,\xi)\big]\Big\}\end{aligned} \tag{6.32}$$

Maintenant on utilise l'ingrédient principal de cette preuve qui est la formule de trace locale fournie par l'assertion (ii) du Théorème 6.32 de la section 6. Par souci de lisibilité, on énonce ci-dessous ce résultat :

Théorème. *Soient $\beta > 0$ et $\mu \in \mathbb{R}$. Pour tout entier $m, n \geq 1$, considérons la trace :*

$$\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\beta,\mu) := \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\Big\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi) R^m_\infty(0,\xi)p_{\alpha_1}R_\infty(0,\xi)\cdots p_{\alpha_n}R_\infty(0,\xi)\Big\}$$

Alors sous l'hypothèse supplémentaire que le potentiel $V \in \mathcal{C}^r(\mathbb{T}^3)$, avec $r \geq 6n-1$, on a :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\beta,\mu) = \frac{1}{|\Omega^*|}\sum_{j_1,\dots,j_n=1}^{\infty}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_1}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot \\ \cdot \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+1}(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_n}(\mathbf{k})-\xi)}\end{aligned}$$

où toute les séries ci-dessus sont absolument convergentes et $\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})$ est défini par (6.26).

Remarque 6.21. Dans la preuve de (ii) Théorème 6.32 (voir section 6), on montre que l'on peut intervertir les séries avec les intégrales dans l'expression ci-dessus. En particulier,

$$\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\beta,\mu) = \frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{j_1,\dots,j_n=1}^{\infty} \hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_1}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot \\ \cdot \int_\gamma \mathrm{d}\xi \, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+1}(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_n}(\mathbf{k})-\xi)}$$

et les séries sont absolument convergentes uniformément en $\mathbf{k}$.

En appliquant les résultats de (ii) Théorème 6.32 aux traces (6.31) et (6.32), on obtient :

Proposition 6.22. *Soient $\beta > 0$, $\rho_0 > 0$ fixés. Soit $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta,\rho_0) \in \mathbb{R}$ l'unique solution de $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, 0) = \rho_0$. Alors les traces* (6.31) *et* (6.32) *peuvent être réécrites comme :*

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,1}(\beta,\mu_\infty,0)\big\} = -\frac{1}{4}\frac{1}{|\Omega^*|}\sum_{j_1,\dots,j_4=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k})\cdot \\ \cdot \frac{1}{2i\pi}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_4}(\mathbf{k})-\xi)} \tag{6.33}$$

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta,\mu_\infty,0)\big\} = -\frac{1}{4}\frac{1}{|\Omega^*|}\Bigg\{\sum_{j_1=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\frac{1}{2i\pi}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3}+ \\ -\sum_{j_1,j_2=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\mathcal{C}_{j_1,j_2}(\mathbf{k})\frac{1}{2i\pi}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)}\Bigg\} \tag{6.34}$$

où $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k})$ est définie en (6.30) *et $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathcal{C}_{j_1,j_2}(\mathbf{k})$ est définie par :*

$$\mathcal{C}_{j_1,j_2}(\mathbf{k}) := \hat{\pi}_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_1}(1;\mathbf{k}) + \hat{\pi}_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_1}(2;\mathbf{k}) = |\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})|^2 + |\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})|^2 \tag{6.35}$$

Remarque 6.23. L'hypothèse $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$ supposée au début du chapitre peut être affaiblie. En effet, chaque terme constitutif des traces (6.31) et (6.32) comporte au plus 4 composantes p_j de l'opérateur impulsion. En vertu de (ii) Théorème 6.32, les expressions (6.33) et (6.34) restent simultanément valable lorsque $V \in \mathcal{C}^r(\mathbb{T}^3)$ avec $r \geq 23$.

Les deux traces (6.33) et (6.34) apparaissant dans l'expression (6.25) sont désormais écrites d'une manière adéquate pour l'application du théorème des résidus.
Désignons les intégrandes apparaissant dans (6.33) et (6.34) respectivement par :

$$\mathfrak{g}_{j_1,j_2}(\beta,\mu_\infty;\xi) := \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)}, \quad j_1,j_2 \in \mathbb{N}^*$$

$$\mathfrak{h}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\beta,\mu_\infty;\xi) := \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_4}(\mathbf{k})-\xi)}, \quad j_1,j_2,j_3,j_4 \in \mathbb{N}^*$$

Remarquons que $\mathfrak{g}_{j_1,j_2}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$ peut avoir des pôles du premier, du troisième et même du quatrième ordre (dans le cas où $j_1 = j_2$). De la même manière, $\mathfrak{h}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$

peut avoir des pôles du premier ordre jusqu'au cinquième ordre au plus (dans le cas où $j_1 = j_2 = j_3 = j_4$). Par le théorème des résidus, il s'ensuit que l'intégration par rapport à la variable ξ de $\mathfrak{h}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$ dans (6.33) (respectivement de $\mathfrak{g}_{j_1,j_2}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$ dans (6.34)) va faire apparaître des dérivées partielles de $\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$ d'ordre au plus égal à 4 (respectivement d'ordre au plus égal à 3).

Revenons maintenant à l'expression (6.25). Compte-tenu des résultats de la Proposition 6.22, puis en vertu de la remarque ci-dessus, on s'attend à obtenir un développement de la susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul du type :

$$\mathcal{X}(\beta,\rho_0) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{2\beta}\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{j_1=1}^{\infty}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{l=0}^{4} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k}) \tag{6.36}$$

avec la convention $(\partial_\xi^0\mathfrak{f})(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k})) := \mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))$. Les deux prochains lemmes identifient ces fonctions $\mathfrak{c}_{j_1,l}(\cdot)$ provenant de (6.33) et (6.34) :

Lemme 6.24. *La trace définie en* (6.33) *peut être réécrite comme :*

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,1}(\beta,\mu_\infty,0)\big\} = -\frac{1}{4}\frac{1}{|\Omega^*|}\sum_{j_1=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\sum_{l=0}^{3}\frac{\partial^l\mathfrak{f}}{\partial\xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{j_1,l}(\mathbf{k}) \tag{6.37}$$

où pour tout $j_1 \in \mathbb{N}^*$ et $\mathbf{k}\in\Omega^*$, les fonctions $\mathfrak{a}_{j_1,3}(\cdot)$ et $\mathfrak{a}_{j_1,2}(\cdot)$ sont définies par :

$$\begin{aligned}\mathfrak{a}_{j_1,3}(\mathbf{k}) := \frac{1}{3!}\Bigg\{&|\hat\pi_{j_1,j_1}(1;\mathbf{k})|^2\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty}\frac{|\hat\pi_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k})}+|\hat\pi_{j_1,j_1}(2;\mathbf{k})|^2\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty}\frac{|\hat\pi_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k})}+\\ &-\hat\pi_{j_1,j_1}(1;\mathbf{k})\hat\pi_{j_1,j_1}(2;\mathbf{k})\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty}\frac{2\Re\big(\hat\pi_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})\hat\pi_{j_2,j_1}(1;\mathbf{k})\big)}{E_{j_2}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k})}\Bigg\}\end{aligned} \tag{6.38}$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{a}_{j_1,2}(\mathbf{k}) := -\frac{1}{2!}\Bigg\{&\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty}\sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq j_1}}^{\infty}\frac{\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_2,j_3}(\mathbf{k})+\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_1,j_3}(\mathbf{k})+\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_1}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k}))(E_{j_3}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k}))}+\\ &+\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty}\frac{\mathcal{C}_{j_2,j_1,j_1,j_1}(\mathbf{k})-\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_2,j_1}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k}))^2}\Bigg\}\end{aligned} \tag{6.39}$$

Remarque 6.25. Il est possible d'identifier dans (6.37) les fonctions $\mathfrak{a}_{j_1,l}(\cdot)$, pour $j_1 \geq 1$ et $l \in \{1,0\}$, puisqu'un tel résultat n'est basé que sur des identités fournies par le théorème des résidus. Cependant, le nombre de termes est très grand et nous n'utiliserons pas ces expressions dans la preuve du Théorème 6.4.

Maintenant on traite l'autre terme :

Lemme 6.26. *La trace définie en* (6.34) *peut être réécrite comme :*

$$\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\big\{\chi_\Omega \mathcal{W}_{\infty,2}(\beta,\mu_\infty,0)\big\} = \frac{1}{4}\frac{1}{|\Omega^*|}\sum_{j_1=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\sum_{l=0}^{3}\frac{\partial^l\mathfrak{f}}{\partial\xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{b}_{j_1,l}(\mathbf{k}) \tag{6.40}$$

où pour tout entier $j_1 \geq 1$ et pour tout $\mathbf{k} \in \Omega^*$, on a :

$$\mathfrak{b}_{j_1,3}(\mathbf{k}) := \frac{1}{6}\big\{|\hat{\pi}_{j_1,j_1}(1;\mathbf{k})|^2 + |\hat{\pi}_{j_1,j_1}(2;\mathbf{k})|^2\big\} \tag{6.41}$$

$$\mathfrak{b}_{j_1,2}(\mathbf{k}) := -\frac{1}{2}\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})|^2 + |\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})|^2}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})} + \frac{1}{2} \tag{6.42}$$

$$\mathfrak{b}_{j_1,s}(\mathbf{k}) := -(2-s)\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})|^2 + |\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})|^2}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k}))^{3-s}}, \quad s \in \{0,1\}$$

Ainsi, le développement (6.27) de la susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul se déduit de (6.25) en utilisant les Lemmes 6.24 et 6.26 ci-dessus ; les fonctions $\mathbf{k} \mapsto \mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k})$ étant définies par :

$$\forall\, j_1 \in \mathbb{N}^*, \quad \mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k}) := \mathfrak{a}_{j_1,l}(\mathbf{k}) + \mathfrak{b}_{j_1,l}(\mathbf{k}), \quad l \in \{0,1,2,3\} \tag{6.43}$$

Pour achever la preuve du Théorème 6.17, il reste à utiliser ce dernier résultat :

Lemme 6.27. *Pour tout entier $j_1 \geq 1$ et $l \in \{0,1,2,3\}$, les applications $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{a}_{j_1,l}(\mathbf{k})$ et $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{b}_{j_1,l}(\mathbf{k})$ sont bornées et continues sur tout sous-ensemble compact de Ω^* où $E_{j_1}(\cdot)$ est isolé du reste du spectre.*

Ainsi, pour tout $j_1 \in \mathbb{N}^*$, les fonctions $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k})$ apparaissant dans (6.27) peuvent avoir des singularités sur un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro où $E_{j_1}(\cdot)$ peut "toucher" les bandes voisines. Cependant l'intégrande dans (6.27) est borné et continu sur Ω^* car il provient des intégrales complexes dans (6.33) et (6.34) qui n'ont pas de singularité locale en $\mathbf{k}$ (cf. Remarque 6.21 et appendice à la fin du chapitre).

3.3 Annexe : preuves des résultats intermédiaires

Preuve Lemme 6.20.
On commence par (6.32). A partir de l'expression du noyau $T_{2,\infty}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ en (5.5) :

$$\begin{aligned} T_{2,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega=0,\xi) &= \frac{1}{8}\{\mathbf{e}_3 \wedge (\mathbf{x}-\mathbf{y})\}\cdot\{\mathbf{e}_3 \wedge (\mathbf{x}-\mathbf{y})\}R^{(1)}_{\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};0,\xi) \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y} \\ &= \frac{1}{8}[(x_2-y_2)^2 + (x_1-y_1)^2]R^{(1)}_{\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};0,\xi) \end{aligned}$$

En insérant cette expression dans celle du noyau diagonal de l'opérateur $\mathcal{W}_{\infty,2}(\beta,\mu,0)$:

$$\begin{aligned} \forall\, \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3, \quad \mathcal{W}_{\infty,2}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\mu,0) &= \frac{1}{8}\int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\cdot \\ &\cdot \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{z}\, R^{(1)}_{\infty}(\mathbf{x},\mathbf{z};0,\xi)[(z_2-x_2)^2 + (z_1-x_1)^2]R^{(1)}_{\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};0,\xi) \end{aligned} \tag{6.44}$$

Soient $l \in \{1,2\}$ et $\mathbf{X}$ l'opérateur multiplication par $\mathbf{x}$. Alors $\forall\, \mathbf{z}\neq\mathbf{x}$, on peut écrire :

$$(z_l - x_l)R^{(1)}_{\infty}(\mathbf{z},\mathbf{x};0,\xi) = [\mathbf{X}\cdot\mathbf{e}_l, R_{\infty}(0,\xi)](\mathbf{z},\mathbf{x}) = \big\{R_{\infty}(0,\xi)[H_{\infty}(0),\mathbf{X}\cdot\mathbf{e}_l]R_{\infty}(0,\xi)\big\}(\mathbf{z},\mathbf{x})$$

Avec $H_\infty(0) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3} p_\alpha^2 + V$, comme $[V, \mathbf{X}\cdot\mathbf{e}_l] = 0$ et $[p_\alpha, \mathbf{X}\cdot\mathbf{e}_l] = -i\delta_{\alpha,l}$ (où $\delta_{i,j}$ est le symbole de Kronecker), alors $[H_\infty(0), \mathbf{X}\cdot\mathbf{e}_l] = -ip_l$. Par conséquent :

$$(z_l - x_l)R_\infty^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{x};0,\xi) = -i\{R_\infty(0,\xi)p_l R_\infty(0,\xi)\}(\mathbf{z},\mathbf{x}) \tag{6.45}$$

Par les règles de commutation usuelles, on déduit de (6.45) que pour $l \in \{1,2\}$ et $\mathbf{z} \neq \mathbf{x}$:

$$(z_l - x_l)^2 R_\infty^{(1)}(\mathbf{z},\mathbf{x};0,\xi) = -\big\{2R_\infty(0,\xi)p_l R_\infty(0,\xi)p_l R_\infty(0,\xi) - R_\infty(0,\xi)R_\infty(0,\xi)\big\}(\mathbf{z},\mathbf{x})$$

Il reste à insérer cette dernière identité dans (6.44), et on obtient (6.32).

Prouvons maintenant (6.31). A partir de l'expression du noyau $T_{1,\infty}(\cdot\,,\cdot\,;\omega,\xi)$ en (5.4) et compte-tenu du fait que $\nabla\cdot\mathbf{a} = 0$, alors pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ on a :

$$\begin{aligned} T_{1,\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y};\omega=0,\xi) &= \frac{i}{2}\nabla_{\mathbf{x}}\cdot\{\mathbf{e}_3 \wedge (\mathbf{x}-\mathbf{y})\}R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};0,\xi) \\ &= i\nabla_{\mathbf{x}}\cdot\Big[-\frac{(x_2-y_2)}{2}\mathbf{e}_1 + \frac{(x_1-y_1)}{2}\mathbf{e}_2\Big]R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y};0,\xi) \end{aligned}$$

En insérant cette expression dans celle du noyau diagonal de l'opérateur $\mathcal{W}_{\infty,1}(\beta,\mu,0)$:

$$\begin{aligned} \forall\,\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3,\quad \mathcal{W}_{\infty,1}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\mu,0) &= \frac{1}{4}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_2\,R_\infty^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;0,\xi)\cdot \\ &\cdot\big\{(i\nabla_{\mathbf{z}_1}\cdot\mathbf{e}_1)[-(z_{1,2}-z_{2,2})R_\infty(0,\xi)(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2)] + (i\nabla_{\mathbf{z}_1}\cdot\mathbf{e}_2)[(z_{1,1}-z_{2,1})R_\infty(0,\xi)(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2)]\big\}\cdot \\ &\cdot\big\{(i\nabla_{\mathbf{z}_2}\cdot\mathbf{e}_1)[-(z_{2,2}-x_2)R_\infty(0,\xi)(\mathbf{z}_2,\mathbf{x})] + (i\nabla_{\mathbf{z}_2}\cdot\mathbf{e}_2)[(z_{2,1}-x_1)R_\infty(0,\xi)(\mathbf{z}_2,\mathbf{x})]\big\} \end{aligned}$$

Puis en utilisant (6.45), on déduit (6.31) à partir de l'identité suivante :

$$\begin{aligned} \forall\,\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3,\quad \mathcal{W}_{\infty,1}(\mathbf{x},\mathbf{x};\beta,\mu,0) &= \frac{1}{4}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_1\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\mathbf{z}_2\,R_\infty(\mathbf{x},\mathbf{z}_1;0,\xi)\cdot \\ &\cdot\big\{ip_1\big(R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi)\big)(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2) - ip_2\big(R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi)\big)(\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2)\big\}\cdot \\ &\cdot\big\{ip_1\big(R_\infty(0,\xi)p_2R_\infty(0,\xi)\big)(\mathbf{z}_2,\mathbf{x}) - ip_2\big(R_\infty(0,\xi)p_1R_\infty(0,\xi)\big)(\mathbf{z}_2,\mathbf{x})\big\} \end{aligned}$$

■

Preuve Lemme 6.24.
Soit $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k})$ la fonction à valeurs complexes apparaissant dans (6.33) :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k}) := &\big\{\hat\pi_{j_1,j_2}(1;\mathbf{k})\hat\pi_{j_2,j_3}(2;\mathbf{k}) - \hat\pi_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})\hat\pi_{j_2,j_3}(1;\mathbf{k})\big\}\cdot \\ &\cdot\big\{\hat\pi_{j_3,j_4}(2;\mathbf{k})\hat\pi_{j_4,j_1}(1;\mathbf{k}) - \hat\pi_{j_3,j_4}(1;\mathbf{k})\hat\pi_{j_4,j_1}(2;\mathbf{k})\big\} \end{aligned}$$

Remarquons que cette fonction est identiquement nulle pour les combinaisons d'indices :

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4, \quad j_1 = j_2 = j_3 \neq j_4, \quad j_1 = j_3 = j_4 \neq j_2$$

Par conséquent le développement de (6.33) comporte des dérivées partielles de $\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\cdot)$ d'ordre au plus égal à 3. D'autre part, puisque les fonctions $\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_1,j_4}(\cdot)$ et $\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_1,j_1}(\cdot)$

sont identiquement nulles, la quadruple somme dans (6.33) se réduit à :

$$\begin{aligned}
&\sum_{j_1,\dots,j_4=1}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_4}(\mathbf{k})-\xi)}+\\
&\qquad = \sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^4(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)}+\\
&\qquad + \sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_2,j_2}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)^3}+\\
&+ \underbrace{\sum_{j_1,\dots,j_4=1}^{\infty}}_{\substack{\text{au plus 2}\\ \text{indices sont égaux}}} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_3,j_4}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)(E_{j_4}(\mathbf{k})-\xi)}
\end{aligned} \tag{6.46}$$

Par application du théorème des résidus dans le premier terme du membre de droite de l'égalité (6.46), on obtient :

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^4(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)} = \sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\mathbf{k})\cdot\\
&\cdot\left\{\frac{1}{3!}\frac{1}{E_{j_3}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k})}\frac{\partial^3\mathfrak{f}}{\partial\xi^3}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))+\frac{3}{3!}\frac{1}{(E_{j_3}(\mathbf{k})-E_{j_1}(\mathbf{k}))^2}\frac{\partial^2\mathfrak{f}}{\partial\xi^2}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))+\right.\\
&\qquad\qquad \left.+\text{ autres termes faisant intervenir } \frac{\partial^l\mathfrak{f}}{\partial\xi^l}(\beta,\mu_\infty;\cdot),\text{ avec } l\leq 1\right\}
\end{aligned}$$

La fonction $\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\cdot)$ en facteur de $\frac{\partial^3\mathfrak{f}}{\partial\xi^3}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))$ correspond à $\mathfrak{a}_{j_1,3}(\cdot)$ puisque :

$$\forall\,\mathbf{k}\in\Omega^*,\quad \mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\mathbf{k}) = \left|\hat{\pi}_{j_1,j_1}(1;\mathbf{k})\hat{\pi}_{j_1,j_3}(2;\mathbf{k})-\hat{\pi}_{j_1,j_1}(2;\mathbf{k})\hat{\pi}_{j_1,j_3}(1;\mathbf{k})\right|^2$$

Notons que $\mathcal{C}_{j_1,j_1,j_3,j_1}(\cdot)$ contribue également au terme $\mathfrak{a}_{j_1,2}(\cdot)$.
En appliquant encore une fois le théorème des résidus dans le second terme du membre de droite de l'égalité (6.46), on obtient :

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_2,j_2}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^2(E_{j_3}(\mathbf{k})-\xi)^3}\\
&\qquad = \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2,j_2,j_2}(\mathbf{k})\left\{-\frac{1}{2!}\frac{1}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-E_{j_2}(\mathbf{k}))^2}\frac{\partial^2\mathfrak{f}}{\partial\xi^2}(\beta,\mu_\infty;E_{j_2}(\mathbf{k}))+\right.\\
&\qquad\qquad \left.+\text{ autres termes faisant intervenir } \frac{\partial^l\mathfrak{f}}{\partial\xi^l}(\beta,\mu_\infty;\cdot),\text{ avec } l\leq 1\right\}
\end{aligned}$$

La fonction $\mathcal{C}_{j_1,j_2,j_2,j_2}(\cdot)$ apparaissant en facteur de $\frac{\partial^2\mathfrak{f}}{\partial\xi^2}(\beta,\mu_\infty;E_{j_2}(\mathbf{k}))$ contribue à $\mathfrak{a}_{j_1,2}(\cdot)$.

Il reste à isoler dans la quadruple somme de (6.46) (où au plus deux indices sont égaux) toutes les combinaisons fournissant une dérivée partielle de $\mathfrak{f}(\beta, \mu_\infty; \cdot)$ du second ordre. Ces combinaisons d'indices sont :

$$j_1 = j_2 \neq j_3, j_4, \quad j_1 = j_3 \neq j_2, j_4, \quad j_1 = j_4 \neq j_2, j_3$$

La seule chose qu'il reste à faire est d'appliquer encore une fois le théorème des résidus et de regrouper tous les termes en facteur de $\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; \cdot)$.

■

Preuve Lemme 6.26.
En séparant les cas $j_1 = j_2$ et $j_1 \neq j_2$, la double somme dans le développement (6.34) s'écrit comme :

$$\begin{aligned}\sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{j_2=1}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)} \\ = \sum_{j_1=1}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_1}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^4} + \\ + \sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \mathcal{C}_{j_1,j_2}(\mathbf{k})\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)} \qquad (6.47)\end{aligned}$$

En utilisant le théorème des résidus dans le premier terme du membre de droite de (6.47) :

$$\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^4} = \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta,\mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k}))$$

C'est le seul terme fournissant une dérivée partielle de $\mathfrak{f}(\beta, \mu_\infty; \cdot)$ d'ordre 3. En appliquant encore une fois le théorème des résidus dans le second terme du membre de droite de (6.47) :

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)} \\ = -\frac{1}{2!}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\left[\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)}\right]_{\xi=E_{j_1}(\mathbf{k})} - \left[\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3}\right]_{\xi=E_{j_2}(\mathbf{k})}\end{aligned}$$

avec, en utilisant la formule de Leibniz :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\left[\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)}\right] = \\ \frac{1}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)}\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta,\mu_\infty;\xi) + \frac{2}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)^2}\frac{\partial \mathfrak{f}}{\partial \xi}(\beta,\mu_\infty;\xi) + \frac{2\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)^3}\end{aligned}$$

La seule chose qu'il reste à faire est de regrouper tous les termes après avoir remarqué que l'autre somme apparaissant dans (6.34) peut être écrite comme :

$$\sum_{j_1=1}^{\infty}\left(\frac{1}{2i\pi}\right)\int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^3} = -\frac{1}{2!}\sum_{j_1=1}^{\infty}\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta,\mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k}))$$

■

Preuve Lemme 6.27.
Pour $j \geq 1$ un entier, soit $u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$ une fonction propre de la fibre $H(\mathbf{k})$ avec $\mathbf{k} \in \Omega^*$. La fonction $u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$ est $\mathbb{Z}^3$-périodique et compte-tenu du fait que $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$, $u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$ est lisse d'après le lemme de Sobolev (voir par ex. [91]).
Soient $p_\alpha := (-i\nabla)\cdot\mathbf{e}_\alpha$, $\alpha \in \{1,2,3\}$, les composantes de l'opérateur impulsion défini dans $L^2(\Omega)$ avec conditions de bords périodiques. Par la théorie des perturbations standardes, les applications $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto u_j(\cdot\,;\mathbf{k}) \in L^2(\Omega)$ et $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto p_\alpha u_j(\cdot\,;\mathbf{k}) \in L^2(\Omega)$ sont continues. Il s'ensuit que l'application $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k}) = \langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), p_\alpha u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle$, avec $i,j \in \mathbb{N}^*$, est une fonction continue.
Maintenant choisissons un terme générique apparaissant dans les fonctions $\mathbf{k} \mapsto \mathfrak{a}_{j_1,l}(\mathbf{k})$ et $\mathbf{k} \mapsto \mathfrak{b}_{j_1,l}(\mathbf{k})$, avec $j_1 \geq 1$ et $l \in \{0,1,2,3\}$. Par exemple :

$$\sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq j_1}}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_1,j_2}(2;\mathbf{k})\hat{\pi}_{j_2,j_1}(1;\mathbf{k})}{E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_{j_1}(\mathbf{k})}$$

L'hypothèse faîte sur $E_{j_1}(\cdot\,)$ (i.e. isolée du reste du spectre) permet d'écarter les singularités provenant du dénominateur. Les seuls problèmes de singularité peuvent donc provenir de la somme infinie. Utilisons maintenant l'estimation (6.83) de la Proposition 6.34 en appendice : pour tout entier $M \geq 1$ et pour tout $\xi_0 \geq -E_0 + 1$, il existe une constante $c_{M,\xi_0} > 0$ telle que uniformément en $\mathbf{k} \in \Omega^*$, $\alpha \in \{1,2,3\}$ et $j_1, j_2 \geq 1$:

$$|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha;\mathbf{k})| = |\hat{\pi}_{j_2,j_1}(\alpha;\mathbf{k})| \leq c_{M,\xi_0} \frac{(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{M+\frac{1}{2}}}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^M}$$

Si $|\xi_0|$ est assez large et $M \geq 2$ (cf. Lemme 6.44), la série indexée en j_2 est absolument convergente et uniformément bornée sur les compacts où $E_{j_1}(\cdot\,)$ est isolée du reste du spectre. Le prix à payer est l'apparition d'un polynôme en $(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{M+\frac{1}{2}}$. Mais la décroissance exponentielle de $(\partial_\xi^l \mathfrak{f})(\beta, \mu_\infty; E_{j_1}(\mathbf{k}))$ fera converger la série indexée en j_1.

■

4 Susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul, à température nulle et à densité fixée

Ici on prouve (i) et (ii) du Théorème 6.4 à partir du développement (6.27).

4.1 Cas des semi-conducteurs (SC) - Preuve de (i) Théorème 6.4

Pour $\beta > 0$ et $\rho_0 > 0$, soit $\mu_\infty = \mu_\infty(\beta, \rho_0) \in \mathbb{R}$ l'unique solution de $\rho_\infty(\beta, \mathrm{e}^{\beta\mu}, 0) = \rho_0$. En utilisant que $\mathfrak{f}_{FD}(\beta,\mu;\xi) = -\beta^{-1}\partial_\xi \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)$, l'expression (6.27) peut être réécrite :

$$\mathcal{X}(\beta,\rho_0) = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot$$
$$\cdot \sum_{j_1=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \left\{ \sum_{l=0}^{2} \frac{\partial^l \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,1+l}(\mathbf{k}) - \frac{1}{\beta}\mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,0}(\mathbf{k}) \right\} \quad (6.48)$$

A partir de (6.48), la preuve de (i) du Théorème 6.4 repose sur deux ingrédients essentiels. Le premier est que pour tout $\mu \geq E_0$ fixé, on a les convergences point par point :

$$\forall\, \xi \in [E_0, +\infty) \setminus \{\mu\}, \quad \begin{aligned} &\lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{\beta} \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi) = (\mu - \xi)\chi_{[E_0,\mu]}(\xi) \\ &\lim_{\beta \to +\infty} \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi) = \chi_{[E_0,\mu]}(\xi) \end{aligned} \tag{6.49}$$

ainsi que les convergences aux sens des distributions :

$$\lim_{\beta \to +\infty} \frac{\partial \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \xi}(\beta, \mu; \xi) = -\delta(\xi - \mu), \quad \lim_{\beta \to +\infty} \frac{\partial^2 \mathfrak{f}_{FD}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu; \xi) = -\partial_\xi \delta(\xi - \mu) \tag{6.50}$$

Le second ingrédient est lié aux estimations sur les dérivées partielles de la distribution de Fermi-Dirac : pour tout $d > 0$ et $j \in \mathbb{N}^*$, il existe une constante $c_{j,d} > 0$ telle que :

$$\sup_{|\xi - \mu| \geq d > 0} |\partial_\xi^j \mathfrak{f}_{FD}(\beta, \mu; \xi)| \leq c_{j,d} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi - \mu|} \tag{6.51}$$

On se place maintenant dans le cas des semi-conducteurs avec un gap non trivial, c'est-à-dire qu'il existe $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $\lim_{\beta \to +\infty} \mu_\infty(\beta, \rho_0) = (\max \mathcal{E}_N + \min \mathcal{E}_{N+1})/2 = \mathcal{E}_F(\rho_0)$ avec $\max \mathcal{E}_N < \min \mathcal{E}_{N+1}$. Puisque l'énergie de Fermi se trouve à l'intérieur d'un gap, tous les termes dans (6.48) contenant des dérivées partielles de la distribution de Fermi-Dirac vont converger vers 0 à la limite $\beta \to +\infty$. Ici l'estimation (6.51) joue un double rôle : d'une part, elle rend la série indexée en j_1 convergente et d'autre part, elle fournit une décroissance exponentielle en β. Enfin en tenant compte de (6.49), on déduit directement (6.4) de (6.48) en posant $\mathfrak{c}_{j_1,1}(\cdot) \equiv \mathfrak{c}_{j_1}(\cdot)$ et $\mathfrak{c}_{j_1,0}(\cdot) \equiv \mathfrak{d}_{j_1}(\cdot)$, $j_1 \in \{1, \ldots, N\}$.

4.2 Cas métallique (M) - Preuve de (ii) Théorème 6.4

Dans le cas des métaux, la limite $\beta \to +\infty$ n'est pas aussi simple que dans le cas des semi-conducteurs puisque l'énergie de Fermi se trouve dans le spectre.
Le point de départ est le même développement (6.27) que l'on modifie en éliminant les dérivées partielles de $\mathfrak{f}(\beta, \mu_\infty; \cdot)$ d'ordre trois dans le but de faire apparaître une contribution du type Landau-Peierls. Cependant cette opération nécessite une hypothèse supplémentaire de non-dégénérescence (qui fournira de la régularité en $\mathbf{k}$) dans un voisinage de la surface de Fermi. Ainsi on est amené à faire l'hypothèse suivante :

Hypothèses. *On suppose qu'il existe un unique $N \in \mathbb{N}^*$ tel que $\lim_{\beta \to +\infty} \mu_\infty(\beta, \rho_0) = \mathcal{E}_F(\rho_0) \in (\min \mathcal{E}_N, \max \mathcal{E}_N)$, c'est-à-dire l'énergie de Fermi se trouve à l'intérieur de la N-ième bande de Bloch $\mathcal{E}_N$. On suppose de plus que $\mathcal{E}_N$ soit une bande simple, i.e. $E_N(\mathbf{k})$ est une valeur propre non dégénérée à l'extérieur d'un ensemble (éventuellement vide) de mesure (de Lebesgue) zéro. On suppose enfin que la surface de Fermi définie par $\mathcal{S}_F := \{\mathbf{k} \in \Omega^* : E_N(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_F(\rho_0)\}$ soit lisse et non dégénérée.*

Notre hypothèse a pour conséquence :

$$\mathrm{dist}\big\{\mathcal{E}_F(\rho_0), \cup_{j=1}^{N-1} \mathcal{E}_j\big\} = d_1 > 0, \quad \mathrm{dist}\big\{\mathcal{E}_F(\rho_0), \cup_{j=N+1}^{\infty} \mathcal{E}_j\big\} = d_2 > 0$$

Notons que $E_1(\mathbf{0})$, le minimum de la plus petite bande de Bloch $\mathcal{E}_1$, est toujours simple (conséquence du théorème de Perron-Frobenius, voir par ex. [93]). Si la densité ρ_0 est suffisamment petite alors l'Hypothèse 4.2 est automatiquement satisfaite puisque la fonction d'énergie de Bloch $\mathbf{k} \mapsto E_1(\mathbf{k})$ est non-dégénérée dans un voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (voir [64]).

En fait, l'hypothèse de non-dégénérescence nous est indispensable pour utiliser la théorie des perturbations régulières permettant d'exprimer les fonctions définies par (6.38), (6.41) et (6.42) (seulement dans le cas où $j_1 = N$) à l'aide des dérivées partielles de $E_N(\cdot)$ par rapport aux variables k_i, pour $\mathbf{k}$ dans un voisinage de la surface de Fermi :

$$\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i} = \hat{\pi}_{N,N}(i;\mathbf{k}), \quad i \in \{1,2,3\}, \tag{6.52}$$

$$\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} = 1 + 2\sum_{\substack{j=1\\ j\neq N}}^{\infty} \frac{|\hat{\pi}_{j,N}(i;\mathbf{k})|^2}{E_N(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k})}, \quad i \in \{1,2,3\}, \tag{6.53}$$

$$\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2} = \sum_{\substack{j=1\\ j\neq N}}^{\infty} \frac{2\Re\big(\hat{\pi}_{j,N}(1;\mathbf{k})\hat{\pi}_{N,j}(2;\mathbf{k})\big)}{E_N(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k})} = \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2 \partial k_1}. \tag{6.54}$$

Ces identités peuvent être obtenues à l'aide de la formule de Feschbach (voir [32], [78]). Il est à noter que les séries ci-dessus sont absolument convergentes si le potentiel V est suffisamment régulier (voir appendice de ce chapitre et [32]).

Maintenant en utilisant l'Hypothèse 4.2, on peut regrouper les coefficients en facteur des dérivées partielles $(\partial_\xi^l \mathfrak{f})(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))$, avec $l \in \{2,3\}$, apparaissant dans le développement (6.27). Ceci nous permet d'isoler une contribution du type Landau-Peierls (la preuve de la proposition ci-dessous se trouve dans l'annexe de cette section) :

Proposition 6.28. *Supposons par simplicité que $\mathcal{E}_N$ soit une bande simple.*
Soient $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{c}_{N,l}(\mathbf{k})$, $l \in \{2,3\}$, les fonctions définies par (6.28) *et* (6.29) *pour $j_1 = N$. Alors, avec $\Omega^* \ni \mathbf{k} \mapsto \mathfrak{a}_{j_1=N,2}(\mathbf{k})$ les fonctions définies en* (6.39)*, on a l'identité :*

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{l=2}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{N,l}(\mathbf{k}) \\
&= \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\left\{\frac{1}{3!}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\,\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 + \mathfrak{a}_{N,2}(\mathbf{k})\right\}
\end{aligned}$$

A partir de (6.27) et de la Proposition 6.28, on déduit un développement pour la susceptibilité "orbitale" en champ magnétique nul tenant compte de l'Hypothèse 4.2 :

Proposition 6.29. *Supposons par simplicité que $\mathcal{E}_N$ soit une bande simple.*
Pour chaque $j_1 \in \mathbb{N}^*$, il existe quatre familles de fonctions $\mathfrak{c}_{j_1,l}(\cdot)$, avec $l \in \{0,1,2,3\}$, définies sur Ω^* en dehors d'un ensemble de mesure (de Lebesgue) zéro, telles que le second

intégrande ci-dessous soit borné et continu sur Ω^* :

$$\begin{aligned}\mathcal{X}(\beta,\rho_0) &= -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12\beta}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot \\ &\cdot\Bigg\{\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta,\mu_\infty;E_N(\mathbf{k}))\left[\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_N(\mathbf{k})\right] + \\ &+ 6\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\left[\sum_{\substack{j_1=1\\ j_1\neq N}}^{\infty}\sum_{l=2}^{3}\frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k}) + \sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{l=0}^{1}\frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta,\mu_\infty;E_{j_1}(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j_1,l}(\mathbf{k})\right]\Bigg\}\end{aligned} \tag{6.55}$$

où par convention $(\partial_\xi^0 \mathfrak{f})(\beta,\mu_\infty;\cdot\,) := \mathfrak{f}(\beta,\mu_\infty;\cdot\,)$ *et :*

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_N(\mathbf{k}) := -2\mathfrak{a}_{N,2}(\mathbf{k}) = \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq N}}^{\infty}\sum_{\substack{j_3=1\\ j_3\neq N}}^{\infty}\frac{\mathcal{C}_{N,N,j_2,j_3}(\mathbf{k}) + \mathcal{C}_{N,j_2,N,j_3}(\mathbf{k}) + \mathcal{C}_{N,j_2,j_3,N}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_N(\mathbf{k}))(E_{j_3}(\mathbf{k}) - E_N(\mathbf{k}))} + \\ + \sum_{\substack{j_2=1\\ j_2\neq N}}^{\infty}\frac{\mathcal{C}_{j_2,N,N,N}(\mathbf{k}) - \mathcal{C}_{N,N,j_2,N}(\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) - E_N(\mathbf{k}))^2}\end{aligned} \tag{6.56}$$

En particulier, pour tout entier $j_1 \geq 1$, les fonctions $\mathfrak{c}_{j_1,3}(\cdot\,)$ et $\mathfrak{c}_{j_1,2}(\cdot\,)$ sont définies par (6.28) et (6.29) respectivement.

La dernière chose qu'il reste à faire est de prendre la limite $\beta \to +\infty$ dans (6.55). Puisque l'énergie de Fermi se trouve à l'intérieur de la bande $\mathcal{E}_N$ et que cette bande est isolée du reste des autres bandes, alors en utilisant (6.50) et (6.51), on a :

$$\lim_{\beta\to+\infty}\frac{1}{\beta}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq N}}^{\infty}\sum_{l=2}^{3}\frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta,\mu_\infty(\beta,\rho_0);E_j(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{j,l}(\mathbf{k}) = 0$$

et, en désignant par $\mathcal{S}_F := \{\mathbf{k}\in\Omega^* : E_N(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_F(\rho_0)\}$ la surface de Fermi,

$$\begin{aligned}\lim_{\beta\to+\infty}\frac{-1}{\beta}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta,\mu_\infty;E_N(\mathbf{k}))\left\{\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_N(\mathbf{k})\right\} \\ = -\int_{\mathcal{S}_F}\frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}}E_N(\mathbf{k})|}\left\{\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_N(\mathbf{k})\right\}\end{aligned}$$

En utilisant ces deux identités ainsi que (6.49), on déduit (6.5) de (6.55) en posant $\mathfrak{c}_{j_1,1}(\cdot\,) \equiv \mathfrak{c}_{j_1}(\cdot\,)$ et $\mathfrak{c}_{j_1,0}(\cdot\,) \equiv \mathfrak{d}_{j_1}(\cdot\,)$, $j_1 \in \{1,\ldots,N\}$.

4.3 Annexe - Preuve Proposition 6.28

A partir de (6.27) sachant (6.43) :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{l=2}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{c}_{N,l}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{N,2}(\mathbf{k})$$
$$+ \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \left[\sum_{l=2}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{b}_{N,l}(\mathbf{k}) + \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{N,3}(\mathbf{k}) \right]$$

En utilisant (6.52) et (6.53), les fonctions $\mathfrak{b}_{N,l}(\cdot)$, $l \in \{2,3\}$, peuvent être réécrites comme :

$$\mathfrak{b}_{N,3}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3!}\left\{ \left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2} \right)^2 \right\},$$
$$\mathfrak{b}_{N,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2!}\frac{1}{2}\left\{ \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} - 1 \right) + \left(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - 1 \right) + 2 \right\} = \frac{1}{2!}\frac{1}{2}\left\{ \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} + \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} \right\}$$

Puisque $E_N(\cdot\,) \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3/2\pi\mathbb{Z}^3)$, une simple intégration par parties permet d'obtenir :

$$\forall\, i \in \{1,2\}, \quad \int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_i \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \mathfrak{f}^3}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k})) \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i}$$
$$= -\int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_i \frac{\partial \mathfrak{f}^2}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k})) \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} \tag{6.57}$$

d'où :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{b}_{N,3}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{3!}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\left\{ \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} + \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} \right\}$$

et :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \sum_{l=2}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{b}_{N,l}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3!}\frac{1}{2}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\left\{ \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} + \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} \right\} \tag{6.58}$$

D'autre part, en utilisant (6.52), (6.53) et (6.54), $\mathfrak{a}_{N,3}(\cdot\,)$ se réécrit comme :

$$\mathfrak{a}_{N,3}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3!}\left\{ \left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1} \right)^2 \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} \right) + \left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2} \right)^2 \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} \right) \right.$$
$$\left. - \left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1} \right)\left(\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2} \right)\left(- \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2} \right) \right\} \tag{6.59}$$

Notons que par une simple intégration par parties :

$$\forall\, i \neq j \in \{1,2\}, \quad \int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k})) \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2}$$
$$= -\int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k})) \frac{\partial}{\partial k_j}\left[\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} \right]$$
$$= -\int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\left\{ \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j^2} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} + \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial}{\partial k_j} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} \right\} \tag{6.60}$$
$$= -\int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\left\{ \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j^2} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} + \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial}{\partial k_i} \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i} \right\}$$

En vertu de (6.59), utilisant (6.60) et (6.57), on obtient :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{N,3}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3!}\frac{1}{2}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\Big\{2\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2}$$
$$+ \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2} + \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_1}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2 \partial k_1} - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2}\Big\} +$$
$$+ \frac{1}{3!}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1}\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2} \quad (6.61)$$

Finalement par une dernière intégration par parties :

$$\forall\, i \neq j \in \{1,2\}, \quad \int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j\, \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j}\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\frac{\partial}{\partial k_i}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i}$$
$$= -\int_{-\pi}^{+\pi} \mathrm{d}k_j \Big\{\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}\frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k})) +$$
$$+ \frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j}\frac{\partial E_N(\mathbf{k})}{\partial k_i}\frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\Big\}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i}$$

Ainsi (6.61) se réduit à :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{N,3}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3!}\frac{1}{2}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))$$
$$\Big\{2\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - 2\Big(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\Big)^2 - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} - \frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2}\Big\} \quad (6.62)$$

En additionnant (6.58) à (6.62) on obtient :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \Big[\sum_{l=2}^{3} \frac{\partial^l \mathfrak{f}}{\partial \xi^l}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{b}_{N,l}(\mathbf{k}) + \frac{\partial^3 \mathfrak{f}}{\partial \xi^3}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\mathfrak{a}_{N,3}(\mathbf{k})\Big]$$
$$= \frac{1}{3!}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \frac{\partial^2 \mathfrak{f}}{\partial \xi^2}(\beta, \mu_\infty; E_N(\mathbf{k}))\Big\{\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1^2}\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \Big(\frac{\partial^2 E_N(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\Big)^2\Big\}$$

■

Notons que la preuve n'est plus valable si $E_N(\cdot)$ "touche" d'autres bandes.
Dans ce cas, l'intégration par parties doit être réalisée le long d'un voisinage tubulaire de la surface de Fermi $\mathcal{S}_F$; le prix à payer étant l'apparition de termes supplémentaires. Ces termes disparaîtront lorsque $\beta \to +\infty$ puisqu'ils décroîssent exponentiellement en β.

5 Approximation de Landau-Peierls

Le but de cette section est d'établir un développement asymptotique de (6.5) dans la limite des faibles densités (i.e. $\rho_0 \to 0$). Ici on prouve le développement (6.6) dont (6.7) est un cas particulier, lequel a été suggéré par T. Kjeldaas et W. Kohn en 1957.

5.1 Preuve de (iii) Théorème 6.4

Rappelons que $E_0 = \min_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_1(\mathbf{k}) = E_1(\mathbf{0})$ et $E_1(\cdot)$ est non-dégénérée dans un voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ avec une matrice Hessienne définie positive (voir [64]). Egalement dans [64], il est prouvé l'existence du développement quadratique de $E_1(\mathbf{k})$ pour $\mathbf{k} \to \mathbf{0}$:

$$E_1(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{1}{2!}\mathbf{k}^T \left[\frac{\partial^2 E_1}{\partial k_i \partial k_j}(\mathbf{0})\right]_{1\le i,j\le 3} \mathbf{k} + \mathcal{O}\big(\mathbf{k}^4\big) \quad \text{lorsque } \mathbf{k} \to \mathbf{0}$$

Comme la matrice Hessienne est symétrique, ce développement quadratique s'écrit encore :

$$E_1(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} \frac{k_i^2}{m_i^*} + \mathcal{O}\big(\mathbf{k}^4\big) \quad \text{lorsque } \mathbf{k} \to \mathbf{0} \tag{6.63}$$

où $[1/m_i^*]_{1\le i\le 3}$ sont les valeurs propres du tenseur de masse effective inverse.

Considérons maintenant l'hypothèse de faible densité $\rho_0 \in (0,1)$. Dans ce cas, l'énergie de Fermi se trouve dans l'intervalle $(E_0, \max_{\mathbf{k}\in\Omega^*} E_1(\mathbf{k}))$. Lorsque $\rho_0 \to 0$, il s'ensuit que $\mathcal{E}_F(\rho_0)$ va converger vers E_0. Le sous-ensemble des $\mathbf{k}$ de Ω^* tel que $E_0 \le E_1(\mathbf{k}) \le \mathcal{E}_F(\rho_0)$ est par conséquent localisé seulement près de l'origine $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

A partir de (6.63), on obtient le développement asymptotique de $\mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0$ lorsque $\rho_0 \to 0$ (la preuve est donnée dans l'annexe de cette section) :

Proposition 6.30. *Lorsque $\rho_0 \to 0$, on a les développements suivants :*

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0 = s\rho_0^{\frac{2}{3}} + \mathcal{O}\big(\rho_0^{\frac{4}{3}}\big), \qquad s := \frac{(6\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{2}\left(\frac{1}{m_1^* m_2^* m_3^*}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.64}$$

Dans le cas particulier où $m_i^* = m^* > 0$ pour $i \in \{1,2,3\}$ et en posant $k_F := (6\pi^2\rho_0)^{\frac{1}{3}}$:

$$\mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0 = \frac{1}{2m^*}k_F^2 + \mathcal{O}\big(k_F^4\big) \tag{6.65}$$

Avant de prouver (iii) Théorème 6.4, on a besoin du résultat technique suivant (sa preuve se trouve dans l'annexe de cette section) :

Lemme 6.31. *Supposons que $E_1(\mathbf{k})$ reste non-dégénérée sur la boule $\mathcal{B}_{\epsilon_0}(\mathbf{0}) := \{\mathbf{k} \in \Omega^* : |\mathbf{k}| \le \epsilon_0\}$, $\epsilon_0 > 0$ assez petit. Supposons que $W : \mathcal{B}_{\epsilon_0}(\mathbf{0}) \to \mathbb{C}$ soit une fonction continue. Alors lorsque $\rho_0 \to 0$, on a les développements asymptotiques suivants :*

$$\int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{\big|\nabla E_1(\mathbf{k})\big|} W(\mathbf{k}) = A\rho_0^{\frac{1}{3}} + o\big(\rho_0^{\frac{1}{3}}\big) \quad \textit{avec} \quad A := \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}\, 4\sqrt{2}\pi W(\mathbf{0})\sqrt{s} \tag{6.66}$$

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}\big(E_1(\mathbf{k})\big) W(\mathbf{k}) = B\rho_0 + o\big(\rho_0\big) \quad \textit{avec} \quad B := \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}\,\frac{8\sqrt{2}\pi}{3} W(\mathbf{0}) s^{\frac{3}{2}} \tag{6.67}$$

où s est le coefficient défini en (6.64).

Avec la Proposition 6.30 et le Lemme 6.31, on a désormais tous les éléments nécessaires pour prouver la formule de Landau-Peierls (6.6). Le point de départ est le développement (6.5) avec $N = 1$. Notons que sous l'hypothèse de faible densité, inutile de supposer que $\mathcal{E}_1$ soit une bande simple puisque $E_1(\cdot)$ est non-dégénérée et analytique sur un voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Considérons le premier terme apparaissant dans le développement (6.5) :

$$-\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{12} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} \left\{ \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_1(\mathbf{k}) \right\}$$

puisque c'est seulement ce terme qui va générer le comportement linéaire en k_F dans (6.6). En effet les autres termes vont se comporter comme ρ_0 : ceci est une conséquence de (6.67) compte-tenu de (6.63) et du fait que les fonctions $\mathfrak{c}_{1,1}(\cdot) \equiv \mathfrak{c}_1(\cdot)$ et $\mathfrak{c}_{1,0}(\cdot) \equiv \mathfrak{d}_1(\cdot)$ sont continues au voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (voir Lemme 6.27). Considérons maintenant la fonction :

$$W(\mathbf{k}) := \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 - 3\mathcal{G}_1(\mathbf{k})$$

En vertu du Lemme 6.27, $W(\cdot)$ est continue dans un voisinage de l'origine. D'après (6.66), la seule chose dont nous avons besoin est de calculer $W(\mathbf{0})$. Le déterminant de la matrice Hessienne donne après quelques calculs :

$$\frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1^2} \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_2^2} - \left(\frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial k_1 \partial k_2}\right)^2 = \frac{1}{m_1^* m_2^*} + \mathcal{O}\big(\mathbf{k}^2\big) \quad \text{lorsque } \mathbf{k} \to \mathbf{0}$$

Ainsi on peut écrire :

$$\mathcal{X}_{\mathrm{M}}(\rho_0) = -\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{24\pi^2} \big(m_1^* m_2^* m_3^*\big)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{1}{m_1^* m_2^*} - 3\mathcal{G}_1(\mathbf{0})\right] (6\pi)^{\frac{1}{3}} \rho_0^{\frac{1}{3}} + o\big(\rho_0^{\frac{1}{3}}\big) \quad \text{lorsque } \rho_0 \to 0$$

Pour achever la preuve, il reste à prouver que $\mathcal{G}_1(\mathbf{0}) = 0$. Rappelons que $\mathcal{G}_1(\cdot)$ est définie en (6.56) et les coefficients entrant dans sa définition sont définis en (6.30).
On commence par montrer que pour tout entier $j_2, j_3 \geq 2$, on a :

$$\mathcal{C}_{1,1,j_2,j_3}(\mathbf{0}) = \mathcal{C}_{1,j_2,j_3,1}(\mathbf{0}) = \mathcal{C}_{j_2,1,1,1}(\mathbf{0}) = \mathcal{C}_{1,1,j_2,1}(\mathbf{0}) = 0$$

En effet dans l'expression de chacune de ces fonctions, il est possible d'identifier des facteurs du type $\hat{\pi}_{1,1}(\alpha; \mathbf{0})$, $\alpha \in \{1, 2\}$, qui ne sont rien d'autre que les dérivées partielles de $E_1(\cdot)$ en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, voir (6.52). Par conséquent, ces termes sont identiquement nuls. Il s'ensuit que :

$$\mathcal{G}_1(\mathbf{0}) = \sum_{j_2=2}^{\infty} \sum_{j_3=2}^{\infty} \frac{\mathcal{C}_{1,j_2,1,j_3}(\mathbf{0})}{(E_{j_2}(\mathbf{0}) - E_1(\mathbf{0}))(E_{j_3}(\mathbf{0}) - E_1(\mathbf{0}))} \tag{6.68}$$

Ensuite en utilisant (6.30), puisque :

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_{1,j_2,1,j_3}(\mathbf{0}) = {} & \hat{\pi}_{1,j_2}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_2,1}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{1,j_3}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_3,1}(1;\mathbf{0}) + \hat{\pi}_{1,j_2}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_2,1}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{1,j_3}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_3,1}(2;\mathbf{0}) \\ & - \hat{\pi}_{1,j_2}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_2,1}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{1,j_3}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_3,1}(1;\mathbf{0}) - \hat{\pi}_{1,j_2}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_2,1}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{1,j_3}(1;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j_3,1}(2;\mathbf{0})\end{aligned}$$

alors (6.68) peut s'écrire encore comme :

$$\mathcal{G}_1(\mathbf{0}) = 2\left|\sum_{j=2}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{1,j}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j,1}(1;\mathbf{0})}{E_j(\mathbf{0}) - E_1(\mathbf{0})}\right|^2 - \left(\sum_{j=2}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{1,j}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j,1}(1;\mathbf{0})}{E_j(\mathbf{0}) - E_1(\mathbf{0})}\right)^2 - \overline{\left(\sum_{j=2}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{1,j}(2;\mathbf{0})\hat{\pi}_{j,1}(1;\mathbf{0})}{E_j(\mathbf{0}) - E_1(\mathbf{0})}\right)}^2 \tag{6.69}$$

On utilise maintenant que pour $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, les fonctions propres $u_l(\cdot\,;\mathbf{0})$ peuvent être choisies réélles. Cela signifie que pour tout entier $j \geq 2$ et $\alpha \in \{1,2\}$, les éléments de matrice $\hat{\pi}_{1,j}(\alpha;\mathbf{0})$ sont purement imaginaires. Comme conséquence, les sommes dans (6.69) sont des nombres réels et s'annulent l'une l'autre. On conclut que $\mathcal{G}_1(\mathbf{0}) = 0$.

5.2 Annexe - Preuves des résultats intermédiaires

Preuve Proposition 6.30.
A partir de (6.63), utilisons le changement de variables $\tilde{k}_i = \frac{k_i}{\sqrt{m_i^*}}$, avec $i \in \{1,2,3\}$:

$$\tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}}) := E_1(\sqrt{m_i^*}\tilde{\mathbf{k}}) = E_0 + \frac{1}{2}\{\tilde{k}_1^2 + \tilde{k}_2^2 + \tilde{k}_3^2\} + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^4) \quad \text{lorsque } \tilde{\mathbf{k}} \to \mathbf{0} \tag{6.70}$$

que l'on peut encore écrire en utilisant les coordonnées sphériques usuelles :

$$\tilde{E}_1(r,\theta,\phi) = E_0 + \frac{1}{2}r^2 + \mathcal{O}(r^4) \quad \text{lorsque } r \to 0 \tag{6.71}$$

On veut exprimer r comme une fonction de $\tilde{E}_1$, θ et ϕ. Pour $\rho_0 > 0$ suffisamment petit, soit $r(\theta,\phi,\rho_0)$ l'unique solution de l'équation $\tilde{E}_1(r(\theta,\phi,\rho_0),\theta,\phi) = \mathcal{E}_F(\rho_0)$.
A partir de (6.71), en posant $\Delta := \mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0$:

$$r(\theta,\phi,\rho_0) = F(r(\theta,\phi,\rho_0)) := \sqrt{2\Delta}[1 + \mathcal{O}(r^2(\theta,\phi,\rho_0))]$$

$r(\theta,\phi,\rho_0)$ étant un point fixe attractif de $F(\cdot)$, la suite $(F(0), F\circ F(0), F\circ F\circ F(0), \ldots)$ converge vers $r(\theta,\phi,\rho_0)$. Comme :

$$F(0) = \sqrt{2\Delta}, \quad F\circ F(0) = \sqrt{2\Delta}[1 + \mathcal{O}(\Delta)] = F\circ F\circ F(0)$$

Alors :

$$r(\theta,\phi,\rho_0) = \sqrt{2\Delta}[1 + \mathcal{O}(\Delta)] \quad \text{lorsque } \Delta \to 0 \tag{6.72}$$

On peut maintenant exprimer ρ_0 en fonction de Δ. Avec $\tilde{\Omega}^* := \frac{\Omega^*}{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}$, (6.13) donne :

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}{(2\pi)^3}\int_{\tilde{\Omega}^*} \mathrm{d}\tilde{\mathbf{k}}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(\tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}})) = \frac{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}{(2\pi)^3}\int_{\{\,\tilde{\mathbf{k}}\in\tilde{\Omega}^*\,:\,E_0+\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{k}}^2+\mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^4)\leq\mathcal{E}_F(\rho_0)\,\}} \mathrm{d}\tilde{\mathbf{k}}$$

puis en utilisant les coordonnées sphériques usuelles :

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\Big\{\int_0^{\sqrt{2\Delta}}\mathrm{d}r\,r^2 + \int_{\sqrt{2\Delta}}^{r(\theta,\phi,\rho_0)}\mathrm{d}r\,r^2\Big\}$$

D'une part :

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\int_0^{\sqrt{2\Delta}}\mathrm{d}r\,r^2 = \frac{4\pi}{3}(2\Delta)^{\frac{3}{2}}$$

et d'autre part, par le changement de variable $R = \frac{r^2}{2\Delta}$:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\int_{\sqrt{2\Delta}}^{r(\theta,\phi,\rho_0)}\mathrm{d}r\,r^2 = \frac{(2\Delta)^{\frac{3}{2}}}{2}\underbrace{\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\int_1^{\frac{r^2(\theta,\phi,\rho_0)}{2\Delta}}\mathrm{d}R\,\sqrt{R}}_{=\mathcal{O}(\Delta)}$$

Il vient des deux calculs ci-dessus le développement suivant :

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} (2\Delta)^{\frac{3}{2}} [1 + \mathcal{O}(\Delta)] \quad \text{lorsque} \quad \Delta \to 0 \tag{6.73}$$

La seule chose qu'il reste à faire maintenant est d'inverser (6.73) afin d'exprimer Δ en fonction de ρ_0 :

$$\Delta = G(\Delta) := \frac{1}{2} \left(\frac{|\Omega||\Omega^*|}{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}} \frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} [1 + \mathcal{O}(\Delta)]$$

Δ étant un point fixe attractif de l'application $G(\cdot)$, la suite $(G(0), G \circ G(0), G \circ G \circ G(0), \ldots)$ converge vers Δ. Comme :

$$G(0) = \frac{1}{2} \left(\frac{(2\pi)^3}{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}} \frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}}, \quad G \circ G(0) = \frac{1}{2} \left(\frac{(2\pi)^3}{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}} \frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} [1 + \mathcal{O}(\rho_0^{\frac{2}{3}})]$$

on obtient finalement :

$$\Delta = \mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0 = \frac{1}{2} \left((2\pi)^3 \frac{4\pi}{3} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{1}{m_1^* m_2^* m_3^*} \right)^{\frac{1}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} [1 + \mathcal{O}(\rho_0^{\frac{2}{3}})] \quad \text{lorsque } \rho_0 \to 0$$

■

Preuve Lemme 6.31.
Comme dans la preuve précédente, utilisons le changement de variables $\tilde{k}_i := \frac{k_i}{\sqrt{m_i^*}}$, avec $i \in \{1, 2, 3\}$. Notons $\tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}}) = E_1(\mathbf{k})$, $\tilde{W}(\tilde{\mathbf{k}}) = W(\mathbf{k})$ et $\tilde{\Omega}^* := \frac{\Omega^*}{\sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*}}$.
On commence par prouver (6.66). Formellement on peut écrire :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} W(\mathbf{k}) &= \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \delta(\mathcal{E}_F(\rho_0) - E_1(\mathbf{k})) W(\mathbf{k}) \\ &= \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \int_{\tilde{\Omega}^*} \mathrm{d}\tilde{\mathbf{k}}\, \delta(\mathcal{E}_F(\rho_0) - \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}})) \tilde{W}(\tilde{\mathbf{k}}) \\ &= \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \int_{\{\, \tilde{\mathbf{k}} \in \tilde{\Omega}^* \,:\, \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}}) = \mathcal{E}_F(\rho_0) \,\}} \frac{\mathrm{d}\sigma(\tilde{\mathbf{k}})}{|\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}})|} \tilde{W}(\tilde{\mathbf{k}}) \end{aligned} \tag{6.74}$$

En considérant le développement quadratique (6.70), il vient :

$$|\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}})|^2 = \tilde{k}_1^2 + \tilde{k}_2^2 + \tilde{k}_3^2 + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^4) = \tilde{\mathbf{k}}^2 [1 + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^2)]$$

d'où :

$$|\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}})| = |\tilde{\mathbf{k}}| [1 + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^2)] \quad \text{lorsque } \tilde{\mathbf{k}} \to \mathbf{0}$$

En vertu des hypothèses faîtes sur $W(\cdot)$, (6.74) devient :

$$\int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} W(\mathbf{0}) \int_{\{\, \tilde{\mathbf{k}} \in \tilde{\Omega}^* \,:\, \tilde{E}_1(\tilde{\mathbf{k}}) = \mathcal{E}_F(\rho_0) \,\}} \mathrm{d}\sigma(\tilde{\mathbf{k}})\, |\tilde{\mathbf{k}}|^{-1} [1 + o(1)] \tag{6.75}$$

Utilisant les coordonnées sphériques et en désignant par $r(\theta, \phi, \rho_0)$ l'unique solution de l'équation $\tilde{E}_1(r(\theta, \phi, \rho_0), \theta, \phi) = \mathcal{E}_F(\rho_0)$; (6.75) s'écrit encore :

$$\int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} W(\mathbf{0}) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \sin\theta\, r(\theta, \phi, \rho_0) [1 + o(1)]$$

Maintenant en posant $\Delta := \mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0$ et en utilisant (6.72) ; lorsque $\Delta \to 0$:

$$\int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} 4\sqrt{2}\pi W(\mathbf{0})\sqrt{\Delta}[1 + o(1)]$$

Finalement en utilisant (6.64) ; lorsque $\rho_0 \to 0$:

$$\int_{\mathcal{S}_F} \frac{\mathrm{d}\sigma(\mathbf{k})}{|\nabla E_1(\mathbf{k})|} W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} 4\sqrt{2}\pi W(\mathbf{0})\sqrt{s}\rho_0^{\frac{1}{3}} + o(\rho_0^{\frac{1}{3}})$$

On prouve maintenant (6.67). A partir du développement quadratique (6.70) :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_1(\mathbf{k}))W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \int_{\{\,\tilde{\mathbf{k}}\in\tilde{\Omega}^* \,:\, E_0+\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{k}}^2+\mathcal{O}(\tilde{\mathbf{k}}^4)\leq\mathcal{E}_F(\rho_0)\,\}} \mathrm{d}\tilde{\mathbf{k}}\, \tilde{W}(\tilde{\mathbf{k}}) \tag{6.76}$$

Utilisant les coordonnées sphériques et en désignant pat $r(\theta, \phi, \rho_0)$ l'unique solution de l'équation $\tilde{E}_1(r(\theta, \phi, \rho_0), \theta, \phi) = \mathcal{E}_F(\rho_0)$; (6.76) s'écrit encore :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_1(\mathbf{k}))W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} W(\mathbf{0}) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \sin\theta \int_0^{r(\theta,\phi,\rho_0)} \mathrm{d}r\, r^2[1 + o(1)]$$

Maintenant en posant $\Delta := \mathcal{E}_F(\rho_0) - E_0$ et en utilisant (6.72) ; lorsque $\Delta \to 0$:

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_1(\mathbf{k}))W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} W(\mathbf{0}) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \sin\theta \cdot \\ \cdot \left\{ \int_0^{\sqrt{2\Delta}} \mathrm{d}r\, r^2[1 + o(1)] + \int_{\sqrt{2\Delta}}^{r(\theta,\phi,\rho_0)} \mathrm{d}r\, r^2[1 + o(1)] \right\}$$

Comme :

$$\int_0^{\sqrt{2\Delta}} \mathrm{d}r\, r^2[1 + o(1)] = \frac{(2\Delta)^{\frac{3}{2}}}{3} + o(\Delta^{\frac{3}{2}}), \quad \int_{\sqrt{2\Delta}}^{r(\theta,\phi)} \mathrm{d}r\, r^2[1 + o(1)] = \mathcal{O}(\Delta^{\frac{5}{2}})$$

il vient :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_1(\mathbf{k}))W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \frac{8\sqrt{2}\pi}{3} W(\mathbf{0})\Delta^{\frac{3}{2}}[1 + o(1)] \quad \text{lorsque } \Delta \to 0$$

Finalement en utilisant (6.64) ; lorsque $\rho_0 \to 0$:

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \chi_{[E_0,\mathcal{E}_F(\rho_0)]}(E_1(\mathbf{k}))W(\mathbf{k}) = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \frac{8\sqrt{2}\pi}{3} W(\mathbf{0})\Big(s\rho_0^{\frac{2}{3}}[1 + \mathcal{O}(\rho_0^{\frac{2}{3}})]\Big)^{\frac{3}{2}} + o(\rho_0) \\ = \sqrt{m_1^* m_2^* m_3^*} \frac{8\sqrt{2}\pi}{3} W(\mathbf{0}) s^{\frac{3}{2}} \rho_0 + o(\rho_0)$$

■

6 Appendice : Quelques résultats techniques

6.1 Formulation du résultat principal

Soit $H_\infty(0)$ l'opérateur de Schrödinger agissant dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ défini par :

$$H_\infty(0) := \frac{1}{2}\big(-i\nabla\big)^2 + V$$

où $V \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ est une fonction à valeurs réélles et périodique relativement à un réseau (non dégénéré) $\boldsymbol{\Upsilon}$ de $\mathbb{R}^3$ (réseau de Bravais) de cellule unité Ω (cellule de Wigner-Seitz). Sans perte de généralité, on supposera par la suite que $\boldsymbol{\Upsilon} \equiv \mathbb{Z}^3$ est le réseau cubique ; par conséquent $\Omega := (-1/2, 1/2)^3$ est le cube unité centré en l'origine des coordonnées.

Pour $\beta > 0$ et $\mu \in \mathbb{R}$, soit $\xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi) := \ln\big(1 + \mathrm{e}^{\beta(\mu-\xi)}\big)$ la fonction holomorphe sur le domaine $\mathfrak{C}$ défini en (6.8). Soit γ le contour orienté positivement défini en (6.9), inclus dans $\mathfrak{C}$ et contournant la demi-droite $[E_0, +\infty)$ avec $E_0 := \inf \sigma(H_\infty(0))$.

Soient $n, l \geq 1$ des entiers tels que $1 \leq l \leq n$. Pour $\alpha_l \in \{1, 2, 3\}$, soient $p_{\alpha_l} := (-i\nabla)\cdot\mathbf{e}_{\alpha_l}$ les composantes cartésiennes de l'opérateur impulsion défini dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Pour $m \in \mathbb{N}^*$, soient $\mathcal{J}_0^m(\beta, \mu)$ et $\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\beta, \mu)$ les traces par unité de volume définies par :

$$\mathcal{J}_0^m(\beta, \mu) := \frac{1}{|\Omega|}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\bigg\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi)(H_\infty(0) - \xi)^{-m}\bigg\} \tag{6.77}$$

$$\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\beta, \mu) := \frac{1}{|\Omega|}\mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\bigg\{\chi_\Omega \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi)(H_\infty(0) - \xi)^{-m} \prod_{k=1}^n p_{\alpha_k}(H_\infty(0) - \xi)^{-1}\bigg\} \tag{6.78}$$

La trace locale (6.77) est bien définie en vertu des arguments utilisés dans la Remarque 5.16. Aussi la trace locale (6.78) est bien définie : quand $m \geq 2$, il suffit d'utiliser que $\chi_\Omega(H_\infty(0) - \xi)^{-m}$ est à trace ; quand $m = 1$, il suffit de faire une intégration par parties par rapport à la variable ξ (la primitive de $\mathfrak{f}(\beta, \mu; \cdot\,)$ devant être choisie exponentiellement décroissante sur le contour γ) et d'utiliser que $\chi_\Omega(H_\infty(0) - \xi)^{-1}$ et $\chi_\Omega p_{\alpha_k}(H_\infty(0) - \xi)^{-2}$ sont de Hilbert-Schmidt.

Par des arguments similaires à ceux utilisés dans les preuves des Propositions 4.15, 5.15 et 5.26, on peut montrer plus généralement que les intégrales d'opérateurs définies par :

$$\mathcal{W}^{m,m_1,\ldots,m_n}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n} := \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi)(H_\infty(0) - \xi)^{-m} p_{\alpha_1}(H_\infty(0) - \xi)^{-m_1} \cdots p_{\alpha_n}(H_\infty(0) - \xi)^{-m_n}$$
$$n \geq 1,\ \ 1 \leq l \leq n,\ \ \alpha_l \in \{1, 2, 3\},\ \ m, m_l \in \mathbb{N}^* \tag{6.79}$$

avec par convention :

$$\mathcal{W}_0^m := \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta, \mu; \xi)(H_\infty(0) - \xi)^{-m}, \quad m \in \mathbb{N}^* \tag{6.80}$$

sont des opérateurs intégraux bornés sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. De plus, leur noyau intégral respectif $\mathcal{W}_0^m(\cdot\,,\cdot\,) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ et $\mathcal{W}^{m,m_1,\ldots,m_n}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ sont jointement continus.

Notons $\Omega^* := 2\pi\Omega = (-\pi,\pi)^3$ la cellule élémentaire (première zone de Brillouin) du réseau dual $(\boldsymbol{\Upsilon})^* \equiv 2\pi\mathbb{Z}^3$. En désignant par $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ l'espace de Schwartz des fonctions à décroissance rapide, soit l'opérateur unitaire :

$$\mathcal{U} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \mapsto \mathfrak{h} := L^2\big(\Omega^*, L^2(\Omega)\big) = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, L^2(\Omega)$$
$$(\mathcal{U}f)(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k}) = \frac{1}{|\Omega^*|^{\frac{1}{2}}} \sum_{\boldsymbol{\upsilon}\in\mathbb{Z}^3} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon})} f(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon}), \quad \mathbf{k}\in\Omega^*,\ \underline{\mathbf{x}}\in\Omega,\ f\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$$

qui peut être étendu par continuité en un opérateur unitaire sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. On identifiera par la suite l'espace de Hilbert $L^2(\Omega)$ à $L^2(\mathbb{T}^3)$, avec $\mathbb{T}^3 := \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ le tore à 3 dimensions. La transformation unitaire de $H_\infty(0)$ est décomposable en intégrale directe $\mathcal{U}H_\infty(0)\mathcal{U}^* = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, H(\mathbf{k})$ où, pour chaque $\mathbf{k}\in\Omega^*$, la fibre $H(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(-i\nabla+\mathbf{k})^2 + V$ agit dans $L^2(\mathbb{T}^3)$. $H(\mathbf{k})$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^3)$; le domaine de sa fermeture est l'espace de Sobolev $\mathcal{H}^2(\mathbb{T}^3)$. De plus, $H(\mathbf{k})$ est à résolvante compacte et est borné inférieurement. On notera $\{E_j(\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ l'ensemble des valeurs propres comptées avec leur multiplicité et *indexées dans un ordre croissant.* Les fonctions propres $\{u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\}_{j\geq 1}$ peuvent être choisies telles que $\mathbf{k}\mapsto u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$ soit mesurable sur Ω^* comme fonction à valeurs dans $\mathcal{H}^2(\mathbb{T}^3)$, et tel que pour $\mathbf{k}\in\Omega^*$ fixé, $\big\{u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\big\}_{j=1}^{\infty}$ forme un système orthonormal complet dans $L^2(\mathbb{T}^3)$ (voir [68]). Rappelons qu'avec ce choix d'indexation (ordre croissant), chaque fonction d'énergie de Bloch $\mathbf{k}\mapsto E_j(\mathbf{k})$ est continue (et $2\pi\mathbb{Z}^3$-périodique) mais pas nécessairement différentiable aux points de croisement. Même chose pour $\mathbf{k}\mapsto u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$.

Le résultat suivant donne une représentation des traces par unité de volume $\mathcal{J}_0^m(\beta,\mu)$ et $\mathcal{J}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}^m(\beta,\mu)$ en termes des fonctions d'énergie de Bloch :

Théorème 6.32. *Soient $\beta>0$ et $\mu\in\mathbb{R}$.*
Soient $n,l\in\mathbb{N}^*$ tels que $1\leq l\leq n$ et $p_{\alpha_l} := (-i\nabla)\cdot\mathbf{e}_{\alpha_l}$, $\alpha_l\in\{1,2,3\}$.
(i). Pour $m\in\mathbb{N}^*$, soit $\mathcal{J}_0^m(\beta,\mu)$ la trace locale définie en (6.77)*. Alors :*

$$\mathcal{J}_0^m(\beta,\mu) = \frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{j=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m} \tag{6.81}$$

(ii). Pour $m\in\mathbb{N}^*$, soit $\mathcal{J}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}^m(\beta,\mu)$ la trace locale définie en (6.78)*.*
Alors sous l'hypothèse supplémentaire que le potentiel $V\in\mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$, avec $R\geq 6n-1$:

$$\mathcal{J}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}^m(\beta,\mu) = \frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_n=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_1}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot$$
$$\cdot\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+1}(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_n}(\mathbf{k})-\xi)} \tag{6.82}$$

où pour tout $i,j\in\mathbb{N}^*$, $\alpha_l\in\{1,2,3\}$ et $\mathbf{k}\in\Omega^*$, $\hat{\pi}_{i,j}(\alpha_l;\mathbf{k})$ désigne la quantité :

$$\hat{\pi}_{i,j}(\alpha_l;\mathbf{k}) := \int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\overline{u_i(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})}[(p_{\alpha_l}+k_{\alpha_l})u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})] = \big\langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}),(p_{\alpha_l}+k_{\alpha_l})u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\big\rangle$$

et toutes les séries ci-dessus sont absolument convergentes.

Remarque 6.33. Etant donné l'hypothèse nécessaire sur V pour établir l'identité (6.82) ; le lemme de Sobolev (voir par ex. [91]) garantit que $u_l(\cdot\,;\mathbf{k}) \in \mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$.

La suite de l'appendice est consacrée à la preuve du Théorème 6.32. L'ingrédient principal de la preuve est la Proposition 6.34 ci-dessous.

6.2 Un résultat technique important

Proposition 6.34. *Soit $M \geq 1$ un entier et supposons que $V \in \mathcal{C}^{2M-1}(\mathbb{T}^3)$.*
Alors pour tout $\xi_0 > 0$ vérifiant $-\xi_0 < E_0$ et pour tout entier $1 \leq N \leq M$, il existe une constante $c_{N,\xi_0} > 0$ telle que pour tout $\mathbf{k} \in \Omega^*$, $\alpha \in \{1,2,3\}$ et $i,j \in \mathbb{N}^*$:

$$|\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| = |\hat{\pi}_{j,i}(\alpha;\mathbf{k})| \leq c_{N,\xi_0} \frac{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^{N+\frac{1}{2}}}{(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N} \tag{6.83}$$

La preuve de ce résultat nécessite le lemme suivant :

Lemme 6.35. *Soit $M \geq 1$ un entier et supposons que $V \in \mathcal{C}^{2M-1}(\mathbb{T}^3)$. Soit $\alpha \in \{1,2,3\}$.*
Alors pour tout $\xi_0 > 0$ vérifiant $-\xi_0 < E_0$, il existe deux constantes $c_{M,\xi_0} > 0$ et $c'_{M,\xi_0} > 0$ telles que pour tout $\mathbf{k} \in \Omega^*$:

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^M[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]\| \leq c_{M,\xi_0} \tag{6.84}$$

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^M \phi (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}\| \leq c'_{M,\xi_0}, \quad \phi \in \mathcal{C}^{2M}(\mathbb{T}^3) \tag{6.85}$$

où $\|\cdot\|$ désigne ici la norme opérateur sur $L^2(\mathbb{T}^3)$.

Preuve Lemme 6.35.
Avant de commencer la preuve par récurrence, il est nécessaire de remarquer qu'étant donné le choix de ξ_0, il vient immédiatement :

$$\forall\, \mathbf{k} \in \Omega^*, \quad \|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\| \leq c_{0,\xi_0}, \quad c_{0,\xi_0} := (E_0+\xi_0)^{-1} > 0 \tag{6.86}$$

Initialisons la récurrence : cas où $M = 1$.
Vérifions d'abord que $\mathrm{Ran}([p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]) = D(H(\mathbf{k})) = \mathcal{H}^2(\mathbb{T}^3)$. Comme :

$$[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}] = (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[(H(\mathbf{k})+\xi_0), p_\alpha](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}$$

avec $[(H(\mathbf{k})+\xi_0), p_\alpha] = i\partial_\alpha V$, alors $[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]L^2(\mathbb{T}^3) \to D(H(\mathbf{k}))$ et :

$$(H(\mathbf{k})+\xi_0)[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}] = i(\partial_\alpha V)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}$$

d'où :

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]\| \leq \|\partial_\alpha V\|_\infty c_{0,\xi_0} := c_{1,\xi_0}$$

D'autre part :

$$(H(\mathbf{k})+\xi_0)\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1} = \Big\{ -\frac{1}{2}(\Delta\phi) + \mathbf{k}\cdot(i\nabla\phi) + \Big(\frac{\mathbf{k}^2}{2}+\xi_0\Big)\phi \Big\}\big(H(\mathbf{k})+\xi_0\big)^{-1}$$

étant donné les hypothèses sur ϕ et le fait que Ω^* soit borné, il vient :

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\| \leq c'_{1,\xi_0}$$

Supposons l'hypothèse de récurrence vraie jusqu'au rang M et montrons le rang $M+1$.
(i) Pour la 1ère relation. Vérifions que $\mathrm{Ran}([p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}]) = D(H(\mathbf{k})^{M+1})$.

$$[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}] = (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]+[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M} \tag{6.87}$$

Le premier terme dans le membre de droite de (6.87) peut s'écrire encore :

$$\begin{aligned}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}] &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}, p_\alpha](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M} \\ &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]\end{aligned}$$

comme par hypothèse de récurrence $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]$ est borné, il s'ensuit que $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]L^2(\mathbb{T}^3) \to D(H(\mathbf{k})^{M+1})$.
Quant au second terme dans le membre de droite de (6.87) :

$$\begin{aligned}&[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}](H(\mathbf{k})+\xi_0)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M-1} \\ &\qquad = (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[(H(\mathbf{k})+\xi_0), p_\alpha](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M-1} \\ &\qquad = (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}(i\partial_\alpha V)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\end{aligned}$$

puisque $\partial_\alpha V \in \mathcal{C}^{2M}(\mathbb{T}^3)$, par hypothèse de récurrence, $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}(i\partial_\alpha V)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}$ est borné. Ainsi $[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}L^2(\mathbb{T}^3) \to D(H(\mathbf{k})^{M+1})$.
On peut donc multiplier à gauche par $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M+1}$ de chaque côté de l'égalité (6.87) :

$$\begin{aligned}&(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M+1}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}] \\ &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]+i(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}(\partial_\alpha V)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\end{aligned}$$

L'hypothèse de récurrence donne l'existence de $c_{M+1,\xi_0} > 0$ indépendante de $\mathbf{k}$ telle que :

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M+1}[p_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}]\| \leq c_{M+1,\xi_0}, \quad c_{M+1,\xi_0} := c_{M,\xi_0} + c'_{M,\xi_0}c_{0,\xi_0} > 0$$

(ii) Pour la 2nde relation. Développons $\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}$ à l'aide de commutateurs :

$$\begin{aligned}\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)} &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}\phi + [\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}] \\ &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}\phi + (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}[\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]+ \\ &\quad + [\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\end{aligned}$$

et par l'utilisation des doubles commutateurs :

$$\begin{aligned}\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)} &= (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}\phi + (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}[\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]+ \\ &\quad + (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}] - [(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}, [\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]]\end{aligned} \tag{6.88}$$

Pour le dernier terme de (6.88), l'identité de Jacobi donne :

$$\begin{aligned}&[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}, [\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]] \\ &\qquad = [(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}, [\phi, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]] \\ &\qquad = [(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[(H(\mathbf{k})+\xi_0), \phi](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}] \\ &\qquad = (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\big[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}, [H(\mathbf{k}), \phi]\big](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\end{aligned}$$

et puisque :

$$[H(\mathbf{k}),\phi]=\sum_{\gamma=1}^{3}(\partial_\gamma\phi)p_\gamma+\frac{1}{2}\sum_{\gamma=1}^{3}(\partial_\gamma^2\phi)+i\sum_{\gamma=1}^{3}k_\gamma(\partial_\gamma\phi)$$

alors $[H(\mathbf{k}),\phi]$ peut se mettre sous la forme : $\sum_{\gamma=1}^{3}f_\gamma p_\gamma+g$, où $f_\gamma:=\partial_\gamma\phi$ et g contient au plus des dérivées partielles de ϕ d'ordre 2. Ainsi :

$$(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},[H(\mathbf{k}),\phi]](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}=$$
$$(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\Big\{\sum_{\gamma=1}^{3}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},f_\gamma p_\gamma](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}+[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},g](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\Big\}$$

et (6.88) devient alors :

$$\begin{aligned}\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}&=(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}\Big\{\phi+(H(\mathbf{k})+\xi_0)[\phi,(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}]+\\&+(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[\phi,(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]+(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},g](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}+\\&+\sum_{\gamma=1}^{3}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},f_\gamma p_\gamma](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\Big\}\end{aligned}\tag{6.89}$$

Vérifions à partir de l'identité (6.89) que $\mathrm{Ran}(\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)})=D(H(\mathbf{k})^{M+1})$. Il suffit de vérifier que chaque opérateur entre accolades est borné. Via l'hypothèse de récurrence et le fait que $g\in\mathcal{C}^{2M}(\mathbb{T}^3)$, les 4 premiers termes sont bornés (uniformément en $\mathbf{k}$). Utilisant ensuite l'identité :

$$\sum_{\gamma=1}^{3}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},f_\gamma p_\gamma](H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}=$$
$$\sum_{\gamma=1}^{3}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},f_\gamma]p_\gamma(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}+$$
$$+\sum_{\gamma=1}^{3}\{(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}f_\gamma(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}\}\{(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M}[(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M},p_\gamma]\}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}$$

et le fait que $f_\gamma\in\mathcal{C}^{2M}(\mathbb{T}^3)$, via l'hypothèse de récurrence, l'opérateur ci-dessus est également borné (uniformément en $\mathbf{k}$). On peut donc multiplier à gauche par $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M+1}$ de chaque côté de l'égalité (6.89). L'hypothèse de récurrence donne finalement l'existence d'une constante $c'_{M+1,\xi_0}>0$ indépendante de $\mathbf{k}$ telle que :

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{M+1}\phi(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-(M+1)}\|\leq c'_{M+1,\xi_0}$$

ce qui achève la preuve.

■

Remarque 6.36. Dans la preuve ci-dessus, on a démontré en particulier que pour tout $M\in\mathbb{N}^*$, $[p_\alpha+k_\alpha,(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-M}]L^2(\mathbb{T}^3)\to D(H(\mathbf{k})^M)$.

Remarque 6.37. Sous les mêmes hypothèses que le lemme précédent, les assertions (6.84) et (6.85) peuvent être remplacées (affaiblies) par :

$$\forall\, N \in \mathbb{N}^*,\ 1 \leq N \leq M, \quad \|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^N[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N}]\| \leq c_{N,\xi_0}$$
$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^N \phi (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N}\| \leq c'_{N,\xi_0}, \quad \phi \in \mathcal{C}^{2M}(\mathbb{T}^3)$$

Preuve Proposition 6.34.
Soient $N, M \in \mathbb{N}^*$ tels que $1 \leq N \leq M$. Soit $\xi_0 > 0$ vérifiant $-\xi_0 < E_0$. Soient $i, j \in \mathbb{N}^*$ et $\alpha \in \{1,2,3\}$. En utilisant la définition $\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k}) = \langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (p_\alpha + k_\alpha)u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle$:

$$\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N = \langle (H(\mathbf{k})+\xi_0)^N u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (p_\alpha+k_\alpha)u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle, \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$
$$\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})\frac{1}{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^N} = \langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (p_\alpha+k_\alpha)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N} u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle, \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$

Il en résulte immédiatement :

$$\begin{aligned}\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})\frac{(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N}{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^N} &= \langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (H(\mathbf{k})+\xi_0)^N(p_\alpha+k_\alpha)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N}u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle \\ &= \hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k}) + \langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (H(\mathbf{k})+\xi_0)^N[p_\alpha+k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N}]u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle \qquad (6.90)\end{aligned}$$

où on a utilisé que $[p_\alpha + k_\alpha, (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-N}]L^2(\mathbb{T}^3) \to D(H(\mathbf{k})^N)$ (cf. Remarque 6.36).
Majorons le premier terme dans le membre de droite de l'égalité (6.90).
En utilisant d'abord l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\begin{aligned}|\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| &= |\langle u_i(\cdot\,;\mathbf{k}), (p_\alpha+k_\alpha)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-\frac{1}{2}}(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{\frac{1}{2}}u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle| \\ &\leq (E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^{\frac{1}{2}}\|(p_\alpha+k_\alpha)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-\frac{1}{2}}u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\|\end{aligned}$$

puis la succession d'estimation :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\Big\|\sum_{\alpha=1}^{3}(p_\alpha+k_\alpha)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-\frac{1}{2}}u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\Big\|^2 &= \Big\langle \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3}(p_\alpha+k_\alpha)^2(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}u_j(\cdot\,;\mathbf{k}), u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\Big\rangle \\ &\leq \langle H(\mathbf{k})(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}u_j(\cdot\,;\mathbf{k}), u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle + |\langle V(\cdot\,)(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}u_j(\cdot\,;\mathbf{k}), u_j(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle| \\ &\leq 1 + (|\xi_0| + \|V\|_\infty)\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\|\end{aligned}$$

Il vient par l'intermédiaire de (6.86), l'estimation uniforme en $\mathbf{k}$:

$$|\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| \leq C_{0,\xi_0}(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^{\frac{1}{2}}, \quad C_{0,\xi_0} := \sqrt{2}\big(1 + (|\xi_0| + \|V\|_\infty)c_{0,\xi_0}\big)^{\frac{1}{2}} \qquad (6.91)$$

A partir de (6.90), puis en utilisant (6.91) et (6.84) (avec la Remarque 6.37), on obtient :

$$|\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| \leq C_{0,\xi_0}\frac{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^{N+\frac{1}{2}}}{(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N} + c_{N,\xi_0}\frac{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^N}{(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N}$$

Quitte à choisir ξ_0 assez grand pour que $E_0 + \xi_0 > 1$, avec $C_{N,\xi_0} := C_{0,\xi_0} + c_{N,\xi_0} > 0$:

$$|\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| \leq C_{N,\xi_0}\frac{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^{N+\frac{1}{2}}}{(E_i(\mathbf{k})+\xi_0)^N}$$

La preuve de (6.83) s'achève en remarquant que :

$$\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k}) = \overline{\hat{\pi}_{j,i}(\alpha;\mathbf{k})} \quad \Longrightarrow \quad |\hat{\pi}_{i,j}(\alpha;\mathbf{k})| = |\hat{\pi}_{j,i}(\alpha;\mathbf{k})|$$

■

Remarque 6.38. (6.91) garantit que l'estimation (6.83) est encore valable pour $N = 0$.

6.3 Preuve du Théorème 6.32

On se propose dans ce paragraphe de prouver la formule de trace locale (6.82). On ne donnera que les principaux arguments menant à (6.81).

Preuve (détaillée) de l'identité (6.82)

Soit $\mathcal{U}$ l'isométrie de Bloch définie à la page 214 et $\mathcal{U}^*$ son adjoint défini par :

$$(\mathcal{U}^* g)(\underline{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\upsilon}) := \frac{1}{|\Omega^*|^{\frac{1}{2}}} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon})} g(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k}), \quad \underline{\mathbf{x}} \in \Omega,\ \boldsymbol{\upsilon} \in \mathbb{Z}^3,\ g(\cdot\,;\mathbf{k}) \in L^2(\mathbb{T}^3)$$

Donnons maintenant un résultat démontré dans [20] (les hypothèses de ce résultat ne sont pas formulées telles quelles dans [20] bien qu'elles soient implicites) :

Proposition 6.39. *Soit $\mathcal{G} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ une fonction borélienne bornée.*
Défini par le calcul fonctionnel, soit $\mathcal{G}(H_\infty)$, $H_\infty := H_\infty(0)$, l'opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. Soit $\mathcal{U}\mathcal{G}(H_\infty)\mathcal{U}^* = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathcal{G}(H(\mathbf{k}))$ la décomposition en intégrale directe où pour chaque $\mathbf{k} \in \Omega^*$, la fibre $\mathcal{G}(H(\mathbf{k}))$ est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{T}^3)$. Supposons que $\mathcal{G}(H_\infty)$ soit un opérateur intégral et que son noyau $\mathcal{G}_{H_\infty}(\cdot\,,\cdot)$ vérifie les conditions (suffisantes) suivantes :

$$\max\left\{\operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |\mathcal{G}_{H_\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y})|,\ \operatorname*{ess\,sup}_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{x}\, |\mathcal{G}_{H_\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y})|\right\} < +\infty \ \textit{(conditions de mixité)}$$
$$\textit{et} \quad |\mathcal{G}_{H_\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y})| = \mathcal{O}\big(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{-3-\epsilon}\big),\ \epsilon > 0 \quad \textit{lorsque } |\mathbf{x}-\mathbf{y}| \to +\infty$$

Alors pour chaque $\mathbf{k} \in \Omega^*$, la fibre $\mathcal{G}(H(\mathbf{k}))$ est un opérateur intégral dans le sens :

$$\forall\, \varphi(\cdot\,;\mathbf{k}) \in L^2(\mathbb{T}^3), \quad \big(\mathcal{G}(H(\mathbf{k}))\varphi(\cdot\,;\mathbf{k})\big)(\underline{\mathbf{x}}) = \int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{y}}\, \mathcal{G}_{H(\mathbf{k})}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})\varphi(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) \quad \textit{p.p. tout } \underline{\mathbf{x}} \in \Omega$$

Son noyau intégral $\mathcal{G}_{H(\mathbf{k})}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ vérifie :

$$\textit{p.p. tout } (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \in \Omega\times\Omega, \quad \mathcal{G}_{H(\mathbf{k})}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\upsilon}\in\mathbb{Z}^3} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon}-\underline{\mathbf{y}})} \mathcal{G}_{H_\infty}(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon},\underline{\mathbf{y}})$$

et on a la relation réciproque :

$$\textit{p.p. tout } (\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3, \quad \mathcal{G}_{H_\infty}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \mathcal{G}_{H(\mathbf{k})}(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{k})$$

Si en plus $\mathcal{G}_{H_\infty}(\cdot\,,\cdot)$ est continue sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$ alors $\mathcal{G}_{H(\mathbf{k})}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ peut être prolongé en une fonction continue périodique sur $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$.

Basé sur la Proposition 6.39, on montre que la famille d'opérateurs définie en (6.79) est décomposable en intégrale directe $\mathcal{U}\mathcal{W}^{m,m_1,\ldots,m_n}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}\mathcal{U}^* = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathcal{W}^{m,m_1,\ldots,m_n}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\mathbf{k})$, où :

$$\mathcal{W}^{m,m_1,\ldots,m_n}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\mathbf{k}) := \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)(H(\mathbf{k})-\xi)^{-m} \prod_{\nu=1}^{n} (p_{\alpha_\nu}+k_{\alpha_\nu})(H(\mathbf{k})-\xi)^{-m_\nu}, \quad \mathbf{k} \in \Omega^*$$

De plus $\{\mathcal{W}^{m,m_1,\dots,m_n}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k}), \mathbf{k} \in \Omega^*\}$ est une famille d'opérateurs intégraux bornés sur $L^2(\mathbb{T}^3)$. Chaque noyau $\mathcal{W}^{m,m_1,\dots,m_n}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k}) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{C}$ est continu et peut être prolongé en une fonction continue périodique sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Ce noyau s'écrit au sens des distributions :

$$\mathcal{W}^{m,m_1,\dots,m_n}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) := \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi) \cdot \Big\{ \sum_{j_1=1}^{\infty} \frac{u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^m} \sum_{j_2=1}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)^{m_1}} \cdots$$
$$\cdots \sum_{j_n=1}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_{n-1},j_n}(\alpha_{n-1};\mathbf{k})}{(E_{j_n}(\mathbf{k})-\xi)^{m_{n-1}}} \sum_{j_{n+1}=1}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})}{(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)^{m_n}} \overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})} \Big\}, \ (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \in \Omega \times \Omega, \ \mathbf{k} \in \Omega^*$$

où on a utilisé la représentation spectrale pour le noyau intégral de $(H(\mathbf{k})-\xi)^{-\nu}$:

$$(H(\mathbf{k})-\xi)^{-\nu}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^\nu} u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})} \quad (\underline{\mathbf{x}} \neq \underline{\mathbf{y}} \text{ si } \nu = 1)$$

On va procéder maintenant en 5 étapes.

Etape 1 : Application de la décomposition de Bloch à $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}$, $n \geq 1$, dans (6.78).

A partir de la famille d'opérateurs (6.79), la trace locale (6.78) s'écrit :

$$\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\beta,\mu) = \frac{1}{|\Omega|} \mathrm{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \big\{ \chi_\Omega \mathcal{W}^{m,\overbrace{1,\dots,1}^{n \text{ fois}}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n} \big\}$$

En vertu des arguments ci-dessus, pour $\mathbf{k} \in \Omega^*$, la fibre $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$ s'écrit :

$$\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k}) := \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)(H(\mathbf{k})-\xi)^{-m} \prod_{\nu=1}^{n} (p_{\alpha_\nu} + k_{\alpha_\nu})(H(\mathbf{k})-\xi)^{-1} \tag{6.92}$$

Etape 2 : Intégration par parties par rapport à la variable ξ dans (6.92).

On a besoin du lemme suivant dont la preuve est donnée en annexe :

Lemme 6.40. *Soient $\beta > 0$ et $\mu \in \mathbb{R}$. Soit $\xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi) := \ln\big(1 + \mathrm{e}^{\beta(\mu-\xi)}\big)$ la fonction holomorphe sur le domaine $\mathfrak{C}$ défini en (6.8). Alors toute primitive $\mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\cdot\,)$ d'ordre $Q \in \mathbb{N}^*$ de $\mathfrak{f}(\beta,\mu;\cdot\,)$, i.e. $\frac{\partial^Q \mathfrak{f}_Q}{\partial \xi^Q}(\beta,\mu;\xi) = \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)$, est holomorphe sur le domaine $\mathfrak{C}$.*
De plus, parmi toutes les primitives d'ordre Q de $\mathfrak{f}(\beta,\mu;\cdot\,)$, on peut toujours en choisir une exponentiellement décroissante sur le contour γ défini en (6.9), i.e. il existe $\hat{\mathfrak{f}}_Q(\beta,\mu;\cdot\,)$ et il existe une constante $c_Q(\beta,\mu) > 0$ telles que :

$$\forall\, \xi \in \gamma, \quad |\hat{\mathfrak{f}}_Q(\beta,\mu;\xi)| \leq c_Q(\beta,\mu)\mathrm{e}^{-\beta|\xi|} \tag{6.93}$$

De plus, il existe une autre constante $c_Q(\beta,\mu) > 0$ telle que :

$$\int_\gamma |\mathrm{d}\xi|\, |\hat{\mathfrak{f}}_Q(\beta,\mu;\xi)| \leq c_Q(\beta,\mu) < +\infty \tag{6.94}$$

Soit $Q \in \mathbb{N}^*$ choisi assez grand. En intégrant par parties Q fois par rapport à la variable ξ dans (6.92), la fibre $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$ s'écrit comme une combinaison linéaire finie :

$$\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k}) = (-1)^Q \sum_{\substack{q_1+\cdots+q_{n+1}=Q \\ q_k\in\mathbb{N}}} C_{q_1,\dots,q_{n+1}} \mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k}) \tag{6.95}$$

où, avec la condition $q_1 + q_2 + \cdots + q_{n+1} = Q$:

$$\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k}) = \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\xi)(H(\mathbf{k})-\xi)^{-(m+q_1)} \prod_{\nu=1}^{n} (p_{\alpha_\nu}+k_{\alpha_\nu})(H(\mathbf{k})-\xi)^{-(1+q_{\nu+1})}$$

avec $\mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\cdot\,)$ une primitive d'ordre Q de $\mathfrak{f}(\beta,\mu;\cdot\,)$ choisie exponentiellement décroissante sur le contour γ (cf. Lemme 6.40). Le noyau intégral de $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$ s'écrit alors :

$$\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = (-1)^Q \sum_{\substack{q_1+\cdots+q_{n+1}=Q \\ q_k\in\mathbb{N}}} C_{q_1,\dots,q_{n+1}} \mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) \tag{6.96}$$

avec, au sens des distributions :

$$\begin{aligned}\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \int_\gamma \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)\cdot\Bigg\{ \sum_{j_1=1}^{\infty} \frac{u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+q_1}}\cdot \\ \cdot \sum_{j_2=1}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})}{(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_2}} \cdots \sum_{j_{n+1}=1}^{\infty} \frac{\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})}{(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_{n+1}}} \overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\Bigg\},\ (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \in \Omega\times\Omega\end{aligned} \tag{6.97}$$

Remarque 6.41. Soit $\mathcal{N} \in \mathbb{N}^*$. Pour assurer l'existence d'un indice $q_l \in \mathbb{N}$, avec $1 \le l \le n+1$, vérifiant $q_l \ge \mathcal{N}$ dans chacun des termes $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$ entrant dans la combinaison linéaire (6.95), Q doit vérifier :

$$Q = q_1 + \cdots + q_{n+1} \ge \mathcal{N}\cdot(n+1) - n = n(\mathcal{N}-1) + \mathcal{N}$$

Etape 3 : Réécriture du noyau intégral $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ défini en (6.97).

Ici on choisit Q (la raison sera claire par la suite) de telle sorte que :

$$Q \ge (3n+3)\cdot(n+1) - n \tag{6.98}$$

Compte-tenu de la Remarque 6.41, pour chaque terme $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$ entrant dans la combinaison linéaire (6.95), il existe un indice $q_l \in \mathbb{N}^*$, avec $1 \le l \le n+1$, vérifiant $q_l \ge 3n+3$. Il s'ensuit alors que chaque noyau intégral $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ entrant dans la combinaison linéaire (6.96) vérifie l'un des 3 cas suivants :
Cas 1 : il existe un indice $q_l \in \mathbb{N}^*$, avec $2 \le l \le n$, vérifiant $q_l \ge 3n+3$
Cas 2 : $q_{n+1} \ge 3n+3$ et tous les autres indices vérifient : $q_1,\dots,q_n < 3n+3$
Cas 3 : $q_1 \ge 3n+3$ et tous les autres indices vérifient : $q_2,\dots,q_{n+1} < 3n+3$

Dans les 3 cas énoncés ci-dessus, on démontre :

Proposition 6.42. *Pour* $\mathbf{k} \in \Omega^*$, *soit* $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k}) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{C}$ *le noyau défini en* (6.97). *Alors sous l'hypothèse supplémentaire* $V \in \mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$, *avec* $R \geq 6n-1$ *:*

$$\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_{n+1}=1}^{\infty} u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\cdot\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots$$
$$\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot\overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+q_1}\cdots(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_{n+1}}} \tag{6.99}$$

et les séries ci-dessus sont absolument convergentes uniformément en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}}$ *et* $\mathbf{k}$.
Comme conséquence, $\Omega\times\Omega \ni (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \mapsto \mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\dots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})$ *est continue.*

La preuve de la Proposition 6.42 nécessite les 3 résultats intermédiaires suivants (les preuves de ces lemmes se situent en annexe).

Lemme 6.43. *Soient* $j \geq 1$ *un entier et* $\xi_0 > 0$ *vérifiant* $-\xi_0 < E_0 := \inf\sigma\big(H_\infty(0)\big)$.
Soit $u_j(\cdot\,;\mathbf{k})$ *le vecteur propre normalisé à l'unité associé à la valeur propre* $E_j(\mathbf{k})$.
Alors il existe une constante $c_{\xi_0} > 0$ *telle que uniformément en* j *et en* $\mathbf{k}$ *:*

$$\forall\,\underline{\mathbf{x}} \in \Omega, \quad |u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}\big(E_j(\mathbf{k})+\xi_0\big)$$

Lemme 6.44. *Soient* $\xi_0 > 0$ *vérifiant* $-\xi_0 < E_0$ *choisi assez grand et* $w > \frac{3}{2}$ *un réél.*
Alors la série $\sum_{j\geq 1}\big(E_j(\mathbf{k})+\xi_0\big)^{-w}$ *est absolument convergente et il existe une constante* $c_{\xi_0,w} > 0$ *telle que uniformément en* $\mathbf{k} \in \Omega^*$ *:*

$$\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{(E_j(\mathbf{k})+\xi_0)^w} \leq c_{\xi_0,w} < +\infty$$

Lemme 6.45. *Soient* $\beta > 0$ *et* $\mu \in \mathbb{R}$. *Soit* $\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\cdot\,)$ *une primitive d'ordre* $Q' \in \mathbb{N}^*$ *de* $\mathfrak{f}(\beta,\mu;\cdot\,)$ *choisie exponentiellement décroissante sur le contour* γ. *Alors pour tout* $\xi_0 > 0$ *vérifiant* $-\xi_0 < E_0$ *choisi suffisamment grand et pour tout entier* $\eta_1,\dots,\eta_{n+1} \geq 1$, *il existe une constante* $c_{\xi_0}(\beta,\mu) > 0$ *telle que pour tout* $\mathbf{k} \in \Omega^*$ *et pour* $j_k \in \mathbb{N}^*$ $(1 \leq k \leq n+1)$ *:*

$$\int_\gamma |\mathrm{d}\xi|\,\frac{|\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi|^{\eta_1}\cdots|E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi|^{\eta_{n+1}}} \leq c_{\xi_0}(\beta,\mu)(E_{j_k}(\mathbf{k})+\xi_0)^{-\eta_k}, \quad 1 \leq k \leq n+1 \tag{6.100}$$

Preuve Proposition 6.42.
Soit J le multi-indice $J := (j_1,\dots,j_{n+1})$. Il suffit de prouver l'existence d'une constante $C_{\xi_0}(\beta,\mu) > 0$ uniforme en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}} \in \Omega$ et $\mathbf{k} \in \Omega^*$ telle que :

$$\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_{n+1}=1}^{\infty}|a_J(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})| \leq C_{\xi_0}(\beta,\mu) < +\infty \tag{6.101}$$

où $\{a_J(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})\}_{J\geq 1}$ désigne la suite de fonctions définie par :

$$a_J(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) := u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\cdot\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_l,j_{l+1}}(\alpha_l;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot\overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\cdot$$
$$\cdot\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+q_1}\cdots(E_{j_l}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_l}\cdots(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_{n+1}}}, \ (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \in \Omega\times\Omega$$

En vertu du Lemme 6.43, il existe une constante $c_{\xi_0} > 0$ telle que :

$$|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1; \mathbf{k})| \cdots |\hat{\pi}_{j_l,j_{l+1}}(\alpha_l; \mathbf{k})| \cdots |\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n; \mathbf{k})| \cdot$$
$$\cdot (E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0) \cdot \int_\gamma |\mathrm{d}\xi| \frac{|\mathfrak{f}_Q(\beta, \mu; \xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k}) - \xi|^{m+q_1} \cdots |E_{j_l}(\mathbf{k}) - \xi|^{1+q_l} \cdots |E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) - \xi|^{1+q_{n+1}}} \tag{6.102}$$

On distingue maintenant les 3 cas énoncés au début de l'étape 3.

<u>Cas 1</u> : il existe un indice q_l parmi $q_2, \ldots, q_n$ vérifiant $q_l \geq 3n + 3$.

A partir de (6.102), par l'intermédiaire de (6.100) appliquée à $\eta_k := 1 + q_l$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1; \mathbf{k})| \cdots (E_{j_l}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-(1+q_l)} \cdot$$
$$\cdot |\hat{\pi}_{j_{l-1},j_l}(\alpha_{l-1}; \mathbf{k})||\hat{\pi}_{j_l,j_{l+1}}(\alpha_l; \mathbf{k})| \cdots |\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n; \mathbf{k})|(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)$$

Supposons que $V \in \mathcal{C}^M(\mathbb{T}^3)$, $M \geq 1$ grand, afin de pouvoir utiliser l'estimation (6.83) : pour tout entier $r_1, \ldots, r_n \geq 1$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)\frac{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_1+\frac{1}{2}}}{(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_1}} \cdots \frac{(E_{j_l}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_{l-1}+\frac{1}{2}}}{(E_{j_{l-1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_{l-1}}} \cdot$$
$$\cdot (E_{j_l}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-(1+q_l)}\frac{(E_{j_l}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_l+\frac{1}{2}}}{(E_{j_{l+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_l}} \cdots \frac{(E_{j_n}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_n+\frac{1}{2}}}{(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{r_n}}(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0) \tag{6.103}$$

Choisissons les entiers $r_1, \ldots, r_{l-1}, r_l, \ldots, r_n$ de telle sorte que :

$$\begin{aligned}
r_1 - 1 > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad r_1 > \frac{5}{2} \\
&\vdots \\
r_{l-1} - r_{l-2} - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad r_{l-1} > 2 + r_{l-2} \\
r_n - 1 > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad r_n > \frac{5}{2} \\
&\vdots \\
r_l - r_{l+1} - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad r_l > 2 + r_{l+1}
\end{aligned}$$

avec q_l ayant été choisi suffisamment grand (en conséquence Q) afin d'assurer que :

$$1 + q_l - r_{l-1} - \frac{1}{2} - r_l - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad \Longrightarrow \quad q_l > \frac{3}{2} + r_l + r_{l-1} \tag{6.104}$$

Ainsi les plus petites valeurs entières qu'on puisse choisir pour $r_1, \ldots, r_n$ sont :

$$r_1 = 3 = r_n, \ldots, r_{l-1} = 3 \cdot (l-1), r_l = 3 \cdot (n - l + 1) \tag{6.105}$$

Vu que q_l a été choisi comme $q_l \geq 3n+3$, (6.104) est vérifiée : $q_l > 3 \cdot (n-l+1) + 3 \cdot (l-1) + \frac{3}{2}$.

Notons qu'une condition suffisante sur V garantissant la validité de (6.103) avec le choix d'entiers (6.105) est $V \in \mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$, avec $R \geq 2 \cdot \max\big\{3(l-1), 3(n-l+1)\big\} - 1$, $2 \leq l \leq n$.

<u>Cas 2</u> : $q_{n+1} \geq 3n+3$ et tous les autres indices vérifient $q_1, \ldots, q_n < 3n+3$.

A partir de (6.102), par l'intermédiaire de (6.100) appliquée à $\eta_k := 1 + q_{n+1}$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$\begin{aligned}|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1; \mathbf{k})||\hat{\pi}_{j_2,j_3}(\alpha_2; \mathbf{k})| \cdots \\ \cdots |\hat{\pi}_{j_{n-1},j_n}(\alpha_{n-1}; \mathbf{k})||\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n; \mathbf{k})|(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{1-(1+q_{n+1})}\end{aligned}$$

Supposons que $V \in \mathcal{C}^M(\mathbb{T}^3)$, $M \geq 1$ grand, afin de pouvoir utiliser l'estimation (6.83) : pour tout entier $s_1, \ldots, s_n \geq 1$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$\begin{aligned}|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)\frac{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_1+\frac{1}{2}}}{(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_1}}\frac{(E_{j_3}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_2+\frac{1}{2}}}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_2}} \cdots \\ \cdots \frac{(E_{j_n}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_{n-1}+\frac{1}{2}}}{(E_{j_{n-1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_{n-1}}}\frac{(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_n+\frac{1}{2}}}{(E_{j_n}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{s_n}}(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-q_{n+1}} \qquad (6.106)\end{aligned}$$

Choisissons les entiers $s_1, \ldots, s_{n-1}, s_n$ de telle sorte que :

$$\begin{aligned} s_1 - 1 > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad s_1 > \frac{5}{2} \\ s_2 - s_1 - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad s_2 > 2 + s_1 \\ &\vdots \\ s_n - s_{n-1} - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad s_n > 2 + s_{n-1} \end{aligned}$$

avec q_{n+1} ayant été choisi suffisamment grand (en conséquence Q) afin d'assurer que :

$$q_{n+1} - s_n - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad \Longrightarrow \quad q_{n+1} > 2 + s_n \qquad (6.107)$$

Ainsi les plus petites valeurs entières qu'on puisse choisir pour $s_1, \ldots, s_n$ sont :

$$s_1 = 3, s_2 = 6, \ldots, s_{n-1} = 3(n-1), s_n = 3n \qquad (6.108)$$

Vu que q_{n+1} a été choisi comme $q_{n+1} \geq 3n+3$, (6.107) est vérifiée : $q_{n+1} > 3n+2$.

Notons qu'une condition suffisante sur V garantissant la validité de (6.106) avec le choix d'entiers (6.108) est : $V \in \mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$, avec $R \geq 2 \cdot 3n - 1$.

<u>Cas 3</u> : $q_1 \geq 3n+3$ et tous les autres indices vérifient $q_2, \ldots, q_{n+1} < 3n+3$.

A partir de (6.102), par l'intermédiaire de (6.100) appliquée à $\eta_k := m + q_1$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$\begin{aligned}|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{1-m-q_1}|\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1; \mathbf{k})||\hat{\pi}_{j_2,j_3}(\alpha_2; \mathbf{k})| \cdots \\ \cdots |\hat{\pi}_{j_{n-1},j_n}(\alpha_{n-1}; \mathbf{k})||\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n; \mathbf{k})|(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)\end{aligned}$$

Supposons que $V \in \mathcal{C}^M(\mathbb{T}^3)$, $M \geq 1$ grand, afin de pouvoir utiliser l'estimation (6.83) : pour tout entier $t_1, \cdots, t_n \geq 1$, il existe une autre constante $c_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ telle que :

$$|a_J(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu)(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{1-m-q_1} \frac{(E_{j_1}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_1+\frac{1}{2}}}{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_1}} \frac{(E_{j_2}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_2+\frac{1}{2}}}{(E_{j_3}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_2}} \cdots$$
$$\cdots \frac{(E_{j_{n-1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_{n-1}+\frac{1}{2}}}{(E_{j_n}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_{n-1}}} \frac{(E_{j_n}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_n+\frac{1}{2}}}{(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{t_n}} (E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) + \xi_0) \quad (6.109)$$

Choisissons les entiers $t_1, \ldots, t_{n-1}, t_n$ de telle sorte que :

$$\begin{aligned} t_n - 1 > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad t_n > \frac{5}{2} \\ t_{n-1} - t_n - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad t_{n-1} > 2 + t_n \\ &\vdots \\ t_1 - t_2 - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad t_1 > 2 + t_2 \end{aligned}$$

avec q_1 ayant été choisi suffisamment grand (en conséquence Q) afin d'assurer que :

$$q_1 + m - 1 - t_1 - \frac{1}{2} > \frac{3}{2} \quad \Longrightarrow \quad q_1 + m > t_1 + 3 \quad (6.110)$$

Ainsi les plus petites valeurs entières qu'on puisse choisir pour $t_n, \ldots, t_1$ sont :

$$t_n = 3, t_{n-1} = 6, \ldots, t_2 = 3(n-1), t_1 = 3n \quad (6.111)$$

Vu que q_1 a été choisi comme $q_1 \geq 3n + 3$, (6.110) est vérifiée : $q_1 > 3n + 2$.

Notons qu'une condition suffisante sur V garantissant la validité de (6.109) avec le choix d'entiers (6.111) est : $V \in \mathcal{C}^R(\mathbb{T}^3)$, avec $R \geq 2 \cdot 3n - 1$.

Fin de la preuve :

En vertu du Lemme 6.44, dans chacun des 3 cas ci-dessus, le choix des entiers (6.105) (Cas 1), (6.108) (Cas 2) et (6.111) (Cas 3) assure la convergence de chacune des séries $\sum_{j_i \geq 1} (E_{j_i}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{p_i}$, $1 \leq i \leq n+1$. Il s'ensuit finalement l'existence d'une constante $C_{\xi_0}(\beta, \mu) > 0$ uniforme en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}} \in \Omega$ et $\mathbf{k} \in \Omega^*$ telle que (6.101) soit vérifiée.
Le théorème de Fubini assure alors l'intervertion de l'intégrale (par rapport à la variable ξ) avec les séries dans (6.97), d'où l'identité (6.99). Et puisque $\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\ldots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ est limite uniforme de la série de fonctions continues $\sum_{J \geq 1} a_J(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$, alors la fonction $\Omega \times \Omega \ni (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}) \mapsto \mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\ldots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})$ est continue.

■

Remarque 6.46. Puisque (6.101) est vérifiée, on déduit en particulier :

$$|\mathcal{W}^{m+q_1,1+q_2,\ldots,1+q_{n+1}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}; \mathbf{k})| \leq C(\beta, \mu), \quad (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}) \in \Omega \times \Omega, \ \mathbf{k} \in \Omega^*$$

Etape 4 : Réécriture du noyau intégral $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$ dans (6.96).

L'application $\Omega\times\Omega\ni(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\mapsto\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})$ est continue comme combinaison linéaire finie de fonctions continues (cf. Proposition 6.42). De plus, en vertu de la Remarque 6.46, il existe une autre constante $C(\beta,\mu)>0$ uniforme en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}}\in\Omega$ et $\mathbf{k}\in\Omega^*$ telle que :

$$|\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})|\leq C(\beta,\mu),\quad(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\in\Omega\times\Omega,\ \mathbf{k}\in\Omega^* \tag{6.112}$$

En insérant (6.99) dans (6.96), on obtient :

$$\begin{aligned}\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})&=\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_{n+1}=1}^{\infty}u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\cdot\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot\overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\cdot\\&\cdot\left\{(-1)^Q\int_\gamma\mathrm{d}\xi\,\mathfrak{f}_Q(\beta,\mu;\xi)\cdot\sum_{\substack{q_1+\dots+q_{n+1}=Q\\q_k\in\mathbb{N}}}\frac{C_{q_1,\dots,q_{n+1}}}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+q_1}\cdots(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)^{1+q_{n+1}}}\right\}\end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à appliquer le théorème des résidus deux fois successivement, et on a :

$$\begin{aligned}\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})&=\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_{n+1}=1}^{\infty}u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\cdot\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot\overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\cdot\\&\cdot\int_\gamma\mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^m(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)},\quad(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\in\Omega\times\Omega,\ \mathbf{k}\in\Omega^*\end{aligned}$$

Etape 5 : Fin de la preuve de la formule de trace (6.82).

Utilisons les résultats de la Proposition 6.39 pour relier le noyau intégral de l'opérateur $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}$ au noyau intégral de la fibre $\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{k})$:

$$\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{x},\mathbf{y})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{x},\mathbf{y};\mathbf{k}),\quad(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$$

En utilisant l'estimation uniforme (6.112), on déduit de l'expression ci-dessus que $(\mathbf{x},\mathbf{y})\mapsto\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ est continue par le théorème de continuité sous le signe intégrale.

En utilisant la continuité de $\mathbb{R}^3\ni\mathbf{x}\mapsto\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\mathbf{x},\mathbf{x})$, la trace (6.78) s'écrit alors :

$$\mathcal{J}^m_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\beta,\mu)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\int_\Omega\mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k}) \tag{6.113}$$

Enfin, encore par l'intermédiaire de l'estimation uniforme (6.112), le théorème de Fubini assure l'intervertion des séries avec les intégrales :

$$\begin{aligned}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\int_\Omega\mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})&=\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_{n+1}=1}^{\infty}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\Big(\int_\Omega\mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\overline{u_{j_{n+1}}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})}u_{j_1}(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\Big)\cdot\\&\cdot\hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k})\cdots\hat{\pi}_{j_n,j_{n+1}}(\alpha_n;\mathbf{k})\cdot\int_\gamma\mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^m(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_{n+1}}(\mathbf{k})-\xi)}\end{aligned}$$

Puis via l'identité $\langle u_{j_{n+1}}(\cdot\,;\mathbf{k}), u_{j_1}(\cdot\,;\mathbf{k})\rangle = \delta_{j_{n+1},j_1}$ (symbole de Kronecker), il vient :

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k} \int_{\Omega} \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\, \mathcal{W}^{m,1,\dots,1}_{\alpha_1,\dots,\alpha_n}(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k}) = \sum_{j_1=1}^{\infty} \cdots \sum_{j_n=1}^{\infty} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \hat{\pi}_{j_1,j_2}(\alpha_1;\mathbf{k}) \cdots \hat{\pi}_{j_n,j_1}(\alpha_n;\mathbf{k}) \cdot$$
$$\cdot \int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_{j_1}(\mathbf{k})-\xi)^{m+1}(E_{j_2}(\mathbf{k})-\xi)\cdots(E_{j_n}(\mathbf{k})-\xi)} \tag{6.114}$$

En insérant (6.114) dans (6.113), on obtient (6.82).

■

Preuve succinte de (6.81)

Par l'intermédiaire de la Proposition 6.39, l'opérateur défini en (6.80) est décomposable en intégrale directe $\mathcal{U}\mathcal{W}_0^m\mathcal{U}^* = \int_{\Omega^*}^{\oplus} \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathcal{W}_0^m(\mathbf{k})$, où pour $\mathbf{k} \in \Omega^*$, la fibre s'écrit :

$$\mathcal{W}_0^m(\mathbf{k}) := \int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)(H(\mathbf{k})-\xi)^{-m}, \quad \mathbf{k} \in \Omega^* \tag{6.115}$$

De plus $\{\mathcal{W}_0^m(\mathbf{k}), \mathbf{k} \in \Omega^*\}$ est une famille d'opérateurs intégraux bornés sur $L^2(\mathbb{T}^3)$. Chaque noyau intégral $\mathcal{W}_0^m(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k}) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{C}$ est continu et peut être prolongé en une fonction continue périodique sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Ce noyau s'écrit au sens des distributions :

$$\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) := \int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \frac{u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m}, \quad \mathbf{k} \in \Omega^*, \ (\underline{\mathbf{x}} \neq \underline{\mathbf{y}} \text{ si } m=1) \tag{6.116}$$

Suivant les valeurs (entières) de m, on distingue deux cas :

<u>Cas 1</u> : $1 \leq m \leq 3$

On commence par faire $(4-m)$ intégration(s) par parties par rapport à ξ dans (6.115) :

$$\mathcal{W}_0^m(\mathbf{k}) = (-1)^{4-m} \frac{3!}{(m-1)!} \int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\xi)(H(\mathbf{k})-\xi)^{m+4-m}$$

où $\mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\cdot\,)$ est une primitive d'ordre $4-m$ de $\mathfrak{f}(\beta,\mu;\cdot\,)$ choisie exponentiellement décroissante sur le contour γ (cf. Lemme 6.40). En vertu de (6.116), le noyau intégral de $\mathcal{W}_0^m(\mathbf{k})$ s'écrit au sens des distributions :

$$\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = (-1)^{4-m} \frac{3!}{(m-1)!} \int_{\gamma} \mathrm{d}\xi\, \mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\xi) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \frac{u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^4}, \quad (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}}) \in \Omega \times \Omega$$

En utilisant successivement les Lemmes 6.43, 6.45 et 6.44, on montre l'existence d'une constante $C(\beta,\mu) > 0$ uniforme en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}} \in \Omega$ et $\mathbf{k} \in \Omega^*$ telle que :

$$\sum_{j=1}^{\infty} |u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})||\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}| \int_{\gamma} |\mathrm{d}\xi|\, \frac{|\mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\xi)|}{|E_j(\mathbf{k})-\xi|^4} \leq C(\beta,\mu) < +\infty$$

Il s'ensuit alors que :

$$\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = (-1)^{4-m}\frac{3!}{(m-1)!}\sum_{j=1}^{\infty} u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\cdot\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^4}$$

Il reste à réécrire $\mathcal{W}_0^m(\cdot\,,\cdot\,;\mathbf{k})$. Par une première application du théorème des résidus :

$$(-1)^{4-m}\frac{3!}{(m-1)!}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}_{4-m}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^4} = (-1)^{4-m}\frac{3!}{(m-1)!}\frac{2i\pi}{3!}\frac{\partial^3\mathfrak{f}_{4-m}}{\partial\xi^3}(\beta,\mu;E_j(\mathbf{k}))$$

Suivi d'une seconde application, avec $(\partial_\xi^3\mathfrak{f}_{4-m})(\beta,\mu;E_j(\mathbf{k})) = (\partial_\xi^{m-1}\mathfrak{f})(\beta,\mu;E_j(\mathbf{k}))$:

$$(-1)^{4-2m}\left\{\frac{2i\pi}{(m-1)!}(-1)^m\frac{\partial^{m-1}\mathfrak{f}}{\partial\xi^{m-1}}(\beta,\mu;E_j(\mathbf{k}))\right\} = \int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m}$$

il vient :

$$\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m},\quad (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\in\Omega\times\Omega,\ \mathbf{k}\in\Omega^*$$

<u>Cas 2</u> : $m\geq 4$

A partir de (6.116), en utilisant successivement les Lemmes 6.43, 6.45 et 6.44, on montre l'existence d'une constante $C(\beta,\mu)>0$ uniforme en $\underline{\mathbf{x}}$, $\underline{\mathbf{y}}\in\Omega$ et $\mathbf{k}\in\Omega^*$ telle que :

$$\sum_{j=1}^{\infty}|u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})||\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}|\int_\gamma |\mathrm{d}\xi|\,\frac{|\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)|}{|E_j(\mathbf{k})-\xi|^m}\leq C(\beta,\mu)<+\infty$$

Il s'ensuit alors que :

$$\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})\overline{u_j(\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m},\quad (\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\in\Omega\times\Omega,\ \mathbf{k}\in\Omega^* \quad (6.117)$$

Avec les Cas 1 et 2 ci-dessus, on vient de prouver que l'identité (6.117) est valable pour tout $m\in\mathbb{N}^*$. De plus, l'application $\Omega\times\Omega\ni(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}})\mapsto\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{y}};\mathbf{k})$ est continue.

Pour conclure, il suffit de reprendre point par point la même méthode que celle utilisée dans l'étape 5 de la preuve de la formule de trace (6.82). En particulier, on utilise que :

$$\mathcal{J}_0^m(\beta,\mu) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})$$

puis que :

$$\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,\mathcal{W}_0^m(\underline{\mathbf{x}},\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k}) = \int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}\sum_{j=1}^{\infty}\underbrace{\int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{x}}\,|u_j(\underline{\mathbf{x}};\mathbf{k})|^2}_{=1}\int_\gamma \mathrm{d}\xi\,\frac{\mathfrak{f}(\beta,\mu;\xi)}{(E_j(\mathbf{k})-\xi)^m}$$

■

6.4 Annexe

Preuve Lemme 6.40.
Soient $\beta > 0$ et $z := \mathrm{e}^{\beta\mu} \in (0, +\infty)$. Soit $\xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta, z; \xi) = \ln(1 + z\mathrm{e}^{-\beta\xi})$ la fonction holomorphe sur le domaine $\mathfrak{C}$ défini en (6.8). Soit γ le contour orienté positivement défini en (6.9), inclus dans $\mathfrak{C}$ et contournant la demi-droite $[E_0, +\infty)$. Par la suite, on posera $\eta = \eta(\beta) := \frac{\pi}{2\beta}$ et on utilisera la détermination principale du logarithme définie en (2.83).

On commence par prouver (6.93) et (6.94) pour $\mathfrak{f}(\beta, z; \cdot)$.
Soit $\Im\xi = \pm\eta$. Pour tout $\Re\xi \in [\delta, 0]$ et pour tout $\Re\xi \in [0, +\infty)$ respectivement :

$$|\mathfrak{f}(\beta, z; \Re\xi \pm i\eta)| \leq (z + \pi)\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \leq (z + \pi)\mathrm{e}^{\beta(-2\delta+\eta)}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$
$$|\mathfrak{f}(\beta, z; \Re\xi \pm i\eta)| \leq 3z\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \leq 3z\mathrm{e}^{\beta\eta}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$

Soit $\Re\xi = \delta$. Pour tout $\Im\xi \in [-\eta, \eta]$,

$$|\mathfrak{f}(\beta, z; \delta + i\Im\xi)| \leq (z + \pi\mathrm{e}^{\beta\delta})\mathrm{e}^{-\beta\delta} \leq (z + \pi\mathrm{e}^{\beta\delta})\mathrm{e}^{\beta(-2\delta+\eta)}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$

Ces trois estimations donnent l'existence d'une constante $c_0(\beta, z) > 0$ telle que pour tout $\xi \in \gamma$, $|\mathfrak{f}(\beta, z; \xi)| \leq c_0(\beta, z)\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$. Par des changements de variables adaptés, on prouve qu'il existe une constante $C_0(\beta, z) > 0$ telle que $\int_\gamma |\mathrm{d}\xi|\, |\mathfrak{f}(\beta, z; \xi)| \leq C_0(\beta, z) < +\infty$.

Considérons les primitives d'ordre $Q \geq 1$ de $\mathfrak{C} \ni \xi \mapsto \mathfrak{f}(\beta, z_0; \xi)$ construites comme :

$$\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi) := \int_0^\xi \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}(\beta, z; u) - \frac{1}{\beta}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\, \ln(1 + zu_1) \tag{6.118}$$

$$\begin{aligned}\forall\, Q \geq 2, \quad \hat{\mathfrak{f}}_Q(\beta, z; \xi) := &\int_0^\xi \mathrm{d}u\, \hat{\mathfrak{f}}_{Q-1}(\beta, z; u) + \\ &+ \frac{(-1)^Q}{\beta^Q}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\int_0^{u_1} \frac{\mathrm{d}u_2}{u_2}\cdots\int_0^{u_{Q-1}} \frac{\mathrm{d}u_Q}{u_Q}\, \ln(1 + zu_Q)\end{aligned} \tag{6.119}$$

Pour tout $Q \geq 1$, les fonctions $\xi \mapsto \hat{\mathfrak{f}}_q(\beta, z; \xi)$ sont clairement holomorphes sur $\mathfrak{C}$. Montrons que les constantes dans (6.118) et (6.119) ont été choisies de telle sorte que (6.93) et (6.94) soient vérifiées. On donne les détails pour le cas $Q = 1$. Pour le cas $Q \geq 2$, il suffira d'itérer les arguments utilisés pour le cas $Q = 1$ compte-tenu de la définition "récurrente" (6.119).

La primitive $\xi \mapsto \hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi)$ de $\mathfrak{f}(\beta, z; \cdot)$ définie en (6.118) s'écrit encore :

$$\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi) = \int_0^{\Re\xi} \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}(\beta, z; u) - \frac{1}{\beta}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\, \ln(1 + zu_1) + \int_{\Re\xi}^{\Re\xi + i\Im\xi} \mathrm{d}u\, \mathfrak{f}(\beta, z; u)$$

En considérant les changements de variable $X := \mathrm{e}^{-\beta u}$ dans la première intégrale et $Y := \frac{1}{i}(u - \Re\xi)$ dans la troisième intégrale, on obtient :

$$\begin{aligned}&\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi) \\ &= -\frac{1}{\beta}\int_1^{\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}} \frac{\mathrm{d}X}{X}\, \ln(1 + zX) - \frac{1}{\beta}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u_1}{u_1}\, \ln(1 + zu_1) + i\int_0^{\Im\xi} \mathrm{d}Y\, \ln(1 + z\mathrm{e}^{-\beta(\Re\xi + iY)}) \\ &= -\frac{1}{\beta}\int_0^{\mathrm{e}^{-\beta\Re\xi}} \frac{\mathrm{d}X}{X}\, \ln(1 + zX) + i\int_0^{\Im\xi} \mathrm{d}Y\, \ln(1 + z\mathrm{e}^{-\beta(\Re\xi + iY)})\end{aligned}$$

Soit $\Im\xi = \pm\eta$. Pour tout $\Re\xi \in [\delta, 0]$ et pour tout $\Re\xi \in [0, +\infty)$ respectivement :

$$|\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \Re\xi \pm i\eta)| \leq \beta^{-1} z \mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} + (z+\pi)\eta \mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \leq \big((\beta^{-1}+\eta)z + \pi\eta\big)\mathrm{e}^{\beta(-2\delta+\eta)}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$
$$|\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \Re\xi \pm i\eta)| \leq \beta^{-1} z \mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} + 3z\eta \mathrm{e}^{-\beta\Re\xi} \leq z(\beta^{-1}+3\eta)\mathrm{e}^{\beta\eta}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$

Soit $\Re\xi = \delta$. Pour tout $\Im\xi \in [-\eta, \eta]$,

$$|\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \delta + i\Im\xi)| \leq \beta^{-1} z \mathrm{e}^{-\beta\delta} + (z + \pi\mathrm{e}^{\beta\delta})\eta \mathrm{e}^{-\beta\delta} \leq \big((\beta^{-1}+\eta)z + \pi\eta\mathrm{e}^{\beta\delta}\big)\mathrm{e}^{\beta(-2\delta+\eta)}\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$$

Ces trois estimations donnent l'existence d'une constante $c_1(\beta, z) > 0$ telle que pour tout $\xi \in \gamma$, $|\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi)| \leq c_1(\beta, z)\mathrm{e}^{-\beta|\xi|}$. Par des changements de variables adaptés, on prouve qu'il existe une autre constante $C_1(\beta, z) > 0$ telle que $\int_\gamma |\mathrm{d}\xi|\, |\hat{\mathfrak{f}}_1(\beta, z; \xi)| \leq C_1(\beta, z) < +\infty$.

■

Preuve Lemme 6.43.
Ici $\|\cdot\|_2$ désignera la norme opérateur sur $L^2(\Omega)$. Soient $\xi_0 > 0$ vérifiant $-\xi_0 < E_0$ et $\mathbf{k} \in \Omega^*$ fixés. Soit $u_j(\cdot\,; \mathbf{k}) \in \mathcal{H}^2(\mathbb{T}^3)$, $j \geq 1$, le vecteur propre normalisé à l'unité associé à la valeur propre $E_j(\mathbf{k})$ de la fibre $H(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + V$. D'abord on a :

$$u_j(\cdot\,; \mathbf{k}) = (H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}(H(\mathbf{k}) + \xi_0)u_j(\cdot\,; \mathbf{k}) = (E_j(\mathbf{k}) + \xi_0)(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}u_j(\cdot\,; \mathbf{k}) \quad (6.120)$$

Supposons juste un instant que $(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}$ soit borné de $L^2(\Omega) \to L^\infty(\Omega)$ et qu'il existe une constante $c_{\xi_0} > 0$ uniforme en $\mathbf{k}$ (et en j) telle que :

$$\|(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}\|_{2,\infty} \leq c_{\xi_0} \quad (6.121)$$

De (6.120) et (6.121), il vient immédiatement :

$$\|u_j(\cdot\,; \mathbf{k})\|_\infty \leq (E_j(\mathbf{k}) + \xi_0)\|(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}\|_{2,\infty}\|u_j(\cdot\,; \mathbf{k})\|_2 \leq c_{\xi_0}(E_j(\mathbf{k}) + \xi_0)$$

Montrons maintenant que $\|(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}\|_{2,\infty}$ est borné uniformément en $\mathbf{k}$.
Utilisons pour cela les résultats de la Proposition 6.39. Puisque $(H_\infty(0) + \xi_0)^{-1}$ est un opérateur intégral, alors $(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}$ est un opérateur intégral de noyau :

$$\text{p.p. tout } (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}) \in \Omega \times \Omega, \quad (H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}) = \sum_{\boldsymbol{\upsilon} \in \mathbb{Z}^3} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon}-\underline{\mathbf{y}})}(H_\infty(0)+\xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}+\boldsymbol{\upsilon}, \underline{\mathbf{y}})$$

Comme :

$$\|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}\|_{2,\infty}^2 = \operatorname*{ess\,sup}_{\underline{\mathbf{x}} \in \Omega} \|(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \cdot\,)\|_2^2 = \operatorname*{ess\,sup}_{\underline{\mathbf{x}} \in \Omega} \int_\Omega \mathrm{d}\underline{\mathbf{y}}\, |(H(\mathbf{k})+\xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}})|^2$$

en utilisant d'une part l'inégalité de Minkowski et d'autre part le fait que $H_\infty(0)$ commute avec l'opérateur des translations du réseau $\mathbb{Z}^3$ (voir Définition 5.14 avec $\omega = 0$) impliquant :

$$(H_\infty(0) + \xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\upsilon}, \underline{\mathbf{y}}) = (H_\infty(0) + \xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}} - \boldsymbol{\upsilon}) \quad \text{p.p. tout } (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}) \in \Omega \times \Omega$$

il vient :

$$\|(H(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-1}\|_{2,\infty}^2 \leq \operatorname*{ess\,sup}_{\underline{\mathbf{x}} \in \Omega} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |(H_\infty(0) + \xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \mathbf{y})|^2$$

Il reste à utiliser l'estimation (3.2) : il existe un réél $\delta > 0$ suffisamment petit et une constante $c_{\xi_0} > 0$ tels que :

$$\forall\, \underline{\mathbf{x}} \in \Omega, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, |(H_\infty(0) + \xi_0)^{-1}(\underline{\mathbf{x}}, \mathbf{y})|^2 \leq c_{\xi_0} \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\mathbf{y}\, \frac{\mathrm{e}^{-\delta|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \leq c'_{\xi_0}$$

■

Preuve Lemme 6.44.
Rappelons que les valeurs propres de la fibre $H(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(-i\nabla + \mathbf{k})^2$ (lorsque $V \equiv 0$) sont connues explicitement :

$$E_{\mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\big(2\pi\mathbf{n} + \mathbf{k}\big)^2, \quad \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$$

Indexons ces valeurs propres, comptées avec leur multiplicité, dans un ordre croissant. Par le principe variationnel, il vient :

$$\forall\, j \in \mathbb{N}^*, \quad E_j^{(0)}(\mathbf{k}) - \|V\|_\infty \leq E_j(\mathbf{k}) \leq E_j^{(0)}(\mathbf{k}) + \|V\|_\infty$$

En posant $\varsigma := (\xi_0 - \|V\|_\infty)/(2\pi^2) > 0$ avec $\xi_0 > 0$ choisi suffisamment grand, la convergence de la série $\sum_{j\geq 1}\big(E_j(\mathbf{k}) + \xi_0\big)^{-l}$ est donnée par la convergence de l'intégrale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n_3 \, \frac{1}{\Big(\big(n_1 + \frac{k_1}{2\pi}\big)^2 + \big(n_2 + \frac{k_2}{2\pi}\big)^2 + \big(n_3 + \frac{k_3}{2\pi}\big)^2 + \varsigma\Big)^l}$$

En utilisant les coordonnées sphériques usuelles, il reste à utilier que :

$$\forall\, \alpha > 0, \quad \int_0^{+\infty} \mathrm{d}r \, \frac{r^2}{(r^2+\alpha)^l} < +\infty \quad \text{lorsque} \quad l > \frac{3}{2}$$

■

Preuve Lemme 6.45.
En vertu de (6.93), il suffit de prouver qu'il existe une constante $C_{\xi_0}(\beta,\mu) > 0$ telle que :

$$\forall\, \xi \in \gamma, \quad \frac{|\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_1} \cdots |E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_{n+1}}} \leq C_{\xi_0}(\beta,\mu) \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi|}}{(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{\eta_k}} \tag{6.122}$$

D'abord, étant donné les caractéristiques du contour γ (cf. preuve Lemme 6.40) :

$$\forall\, \xi \in \gamma,\ \forall\, j_k \geq 1, \quad |E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi| \geq \varepsilon := \min(\pi/2\beta, |E_0 - \delta|) > 0$$

puis en utilisant la décroissance exponentielle de $\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\cdot)$ sur le contour γ :

$$\forall\, \xi \in \gamma, \quad |\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\xi)| \leq c_{\xi_0}(\beta,\mu)\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi|}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi+\xi_0|}$$

il vient pour tout $\xi \in \gamma$:

$$\frac{|\mathfrak{f}_{Q'}(\beta,\mu;\xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_1} \cdots |E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_{n+1}}} \leq \frac{c_{\xi_0}(\beta,\mu)}{\varepsilon^{\eta_1+\cdots+\eta_{k-1}+\eta_{k+1}+\cdots+\eta_{n+1}}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi|}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi+\xi_0|}}{|E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_k}} \tag{6.123}$$

On décompose maintenant le contour γ en 2 parties : $\gamma = \gamma_k^+ \cup \gamma_k^-$, avec :

$$\gamma_k^+ := \big\{\xi \in \gamma \ : \ |E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi| \geq (E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)/2\big\},$$
$$\gamma_k^- := \big\{\xi \in \gamma \ : \ |E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi| \leq (E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)/2\big\}$$

Comme $\forall\, \xi \in \gamma_k^+$, $|E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi|^{-\eta_k} \leq 2^{\eta_k}(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-\eta_k}$, il s'ensuit de (6.123) :

$$\forall\, \xi \in \gamma_k^+, \quad \frac{|\mathfrak{f}_{Q'}(\beta, \mu; \xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_1} \cdots |E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_{n+1}}} \leq c_{\xi_0}(\beta, \mu) \frac{2^{\eta_k}}{\varepsilon^{\eta_1 + \cdots + \eta_{k-1} + \eta_{k+1} + \cdots + \eta_{n+1}}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi|}}{(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{\eta_k}} \tag{6.124}$$

Comme $\forall\, \xi \in \gamma_k^-$, $|E_{j_k}(\mathbf{k}) - \xi|^{-\eta_k} \leq \varepsilon^{-\eta_k}$ et d'autre part, via l'inégalité triangulaire :

$$\forall\, \xi \in \gamma_k^-, \quad |E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0 - (\xi + \xi_0)| \leq (E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)/2 \implies |\xi + \xi_0| \geq (E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)/2 > 0$$

il s'ensuit de (6.123) :

$$\forall\, \xi \in \gamma_k^-, \quad \frac{|\mathfrak{f}_{Q'}(\beta, \mu; \xi)|}{|E_{j_1}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_1} \cdots |E_{j_{n+1}}(\mathbf{k}) - \xi|^{\eta_{n+1}}} \leq \frac{c_{\xi_0}(\beta, \mu)}{\varepsilon^{\eta_1 + \cdots + \eta_{n+1}}} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2}|\xi|} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{4}(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)} \tag{6.125}$$

Et lorsque ξ_0 est choisi suffisamment grand :

$$\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{4}(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)} \leq (4/\beta)^{\eta_k}(E_{j_k}(\mathbf{k}) + \xi_0)^{-\eta_k}$$

En vertu de (6.124) et (6.125), pour ξ_0 assez grand, on obtient (6.122) en posant :

$$C_{\xi_0}(\beta, \mu) := \frac{c_{\xi_0}(\beta, \mu)}{\varepsilon^{\eta_1 + \cdots + \eta_{k-1} + \eta_{k+1} + \cdots + \eta_{n+1}}} \max(2^{\eta_k}, (4\varepsilon^{-1}\beta^{-1})^{\eta_k}) > 0$$

■

Bibliographie

[1] Abramowitz M., Stegun I.A., *Handbook of mathematical functions*, National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series 55, 1965

[2] Adams E.N., *Magnetic susceptibility of a diamagnetic electron gas - The role of small effective electron mass*, Phys. Rev. 89 (3) (1953), 633–648

[3] Angelescu N., Nenciu G., *On the independence of the thermodynamic limit on the boundary conditions in quantum statistical mechanics*, Comm. Math. Phys. 29 (1973), 15–30

[4] Angelescu N., Bundaru M., Nenciu G., *On the Landau diamagnetism*, Comm. Math. Phys. 42 (1975), 9–28

[5] Angelescu N., Bundaru M., Nenciu G., *On the perturbation of Gibbs semigroups*, Comm. Math. Phys. 42 (1975), 29–30

[6] Angelescu N., Corciovei A., *On free quantum gases in a homogeneous magnetic field*, Rev. Roum. Phys. 30 (7) (1975), 661–671

[7] Ashcroft N., Mermin N., *Solid States Physics*, Saunders College Publishing, 1976

[8] Band W., *Low-temperature diamagnetism of electrons in a cylinder*, Phys. Rev. 91 (1953), 249–255

[9] Berezanskii Y.M., *Selfadjoint Operators in Spaces of Functions of Infinitely Many Variables*, AMS, Vol 63

[10] Berezin F.A., *The Method of Second Quantization*, Academic Press, New York, 1966

[11] Berezin F.A., Shubin M.A., *The Schrödinger Equation*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1991

[12] Berenstein C.A., Gay R., *Complex variables : an introduction*, Graduate Texts in Mathematics 125, Springer Verlag (1991).

[13] Blount E.I., *Bloch electrons in a magnetic field*, Phys. Rev. 126 (1962), 1636–1653

[14] Bratelli O., Robinson D.W., *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II*, Springer-Verlag, New York, 1979

[15] Briet P., Cornean H.D., *Locating the spectrum for magnetic Schrödinger and Dirac opeartors*, Comm. Partial Differential Equations 27 (5-6) (2002), 1079–1101

[16] Briet P., Cornean H.D., Louis D., *Generalized susceptibilities for a perfect quantum gas*, Markov Process. Related Fields 11 (2) (2005), 177-188

[17] Briet P., Cornean H.D., Louis D., *Diamagnetic expansions for perfect quantum gases*, J.Math.Phys. 47 (8) (2006) 083511

[18] Briet P., Cornean H.D., Louis D., *Diamagnetic expansions for perfect quantum gases II : uniform bounds*, Asymptotic Analysis 59(1-2) (2008), 109-123

[19] Briet P., Cornean H.D., Savoie B., *Diamagnetism of quantum gases with singular potentials*, Jour. Phys. A "Duclos Memorial Issue" (2010), arXiv :1005.1584

[20] Briet P., Cornean H.D., Zagrebnov V., *Do bosons condense in a homogeneous magnetic field ?*, J. Stat. Phys. 116 (2004), 1545-1578

[21] Broderix K., Hundertmark D., Leschke H., *Continuity properties of Schrödinger semigroups with magnetic field*, Rev. Math. Phys., 12 (2) (2000), 181–225

[22] Broderix K., Hundertmark D., Müller P., *Continuous integral kernels for unbounded Schrödinger semigroups and their spectral projections*, J. Funct. Anal., 212 (2004), 287–323

[23] Brüning J., Geyler V., Pankrashkin K., *On-diagonal singularities of the Green functions for Schrödinger operators*, J. Math. Phys. 46 (2005), 113508

[24] Brüning J., Geyler V., Pankrashkin K., *Continuity properties of integral kernels associated with Schrödinger operators on manifolds*, Ann. Henri Poincaré 8 (2007), 781–816

[25] Bowers R., *Magnetic susceptibility of sodium metal*, Phys. Rev. 100 (4) (1955), 1141–1144

[26] Cartan H., *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*, Hermann, Paris, 1961

[27] Combes J.M., Thomas L., *Asymptotic behaviour of eigenfunctions for multiparticle Schrödinger operators*, Comm. Math. Phys. 34 (1973), 251–270

[28] Combescure M., Robert D., *Rigorous semiclassical results for the magnetic response of an electron gas*, Rev. Math. Phys. 13 (9) (2001), 1055–1073

[29] Cornean H.D., *On the magnetization of a charged Bose gas in the canonical ensemble*, Comm. Math. Phys., 212 (1) (2000), 1–27

[30] Cornean H.D., Nenciu G., *On eigenfunction decay for two dimensional magnetic Schrödinger operators*, Commun. Math. Phys. 198 (3) (1998), 671–685

[31] Cornean H.D., Nenciu G., *The Faraday effect revisited : Thermodynamic limit*, J. Funct. Anal. 257 (2009), no 7, 2024–2066

[32] Cornean H.D., Nenciu G., *The Faraday effect revisited : sum rules and convergence issues*, arXiv :1004.0108

[33] Critchley R.H., Lewis J.T., *On the free boson gas with spin*, Comm. Math. Phys. 44 (1975), 107–124

[34] Cycon H.L., Froese R.G., Kirsch W., Simon B., *Schrödinger operators, with applications to quantum mechanics and global geometry*, Springer, Berlin-New York, 1987

[35] Davis E.B., *Spectral Theory and Differential Operators*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995

[36] Davies E.B., Simon B., *Ultra-contractivity and the heat kernel for Schrödinger operators and Dirichlet Laplacians*, J. Funct. Anal. 59 (1984), 335–395

[37] De Haas W.J., Van Alphen P.M., Comm. Phys. Lab. Leiden, Nos. 208d, 212a (1930)

[38] Deift P., Hunziker W., Simon B., Vock E., *Pointwise Bounds on Eigenfunctions and Wave Packets in N-body Quantum Systems. IV*, Com. Math. Phys. 64 (1978), 1–34

[39] Dingle R.B., *The diamagnetism of free electrons in finite systems*, Phys. Rev. 82 (1951), 966–966

[40] Dingle R.B., *Some magnetic properties of metals I-IV*, Proc. Roy. Soc. (London) A 211 (1952) 500–516, A 211 (1952) 517–525, A 212 (1952) 38–47, A 212 (1952) 47–65

[41] Dingle R.B., *Low-temperature diamagnetism of electrons in a cylinder*, Phys. Rev. 92 (1953), 1320–1320

[42] Diu B., Guthmann C., Lederer D., Roulet B., *Eléments de physique statistique*, Hermann Editeurs des sciences et des arts, Paris, 2001

[43] Doi, S., Iwatsuka, A., Takuya, M., *The Uniqueness of the Integrated Density of States for the Schrödinger Operators with Magnetic Fields*, Math. Zeit. 237 (2001), 335-371

[44] Dunford N., Schwartz J.T., *Linear Operators, Part II : Spectral Theory, Self Adjoint Operators in Hilbert Space*, Pure and Applied Mathematics, Interscience Publishers, New York, 1963

[45] Freitag E., Busam R., *Complex analysis (Universitext)*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2005

[46] Friedman L., *Question of size corrections to the steady diamagnetic susceptibility of small systems*, Phys. Rev. A 134 (1964), 336–344

[47] Ham F.S., *Effect of the surface on the magnetic properties of an electron gas*, Phys. Rev. 92 (5) (1953), 1113–1119

[48] Hebborn J.E., Luttinger J.M., Sondheimer E.H., Stiles P.J., *The orbital diamagnetic susceptibility of Bloch electrons*, J. Phys. Chem. Solids 25 (1964), 741–749

[49] Hebborn J.E., Sondheimer E.H., *Diamagnetism of conduction electrons in metals*, Phys. Rev. Letters 2 (1959), 150–152

[50] Hebborn J.E., Sondheimer E.H., *The diamagnetism of conduction electrons in metals*, J. Phys. Chem. Solids 13 (1960), 105–123

[51] Helffer B., Mohamed A., *Asymptotics of the density of states for the Schrödinger operator with periodic electric potential*, Duke Math J. 92 (1998), 1–60

[52] Helffer B., Sjöstrand J., *On diamagnetism and de Haas-van Alphen effect*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor. 52 (4) (1990), 303–375

[53] Herbst I.W., Sloan A.D., *Perturbation of translation invariant positivity preserving semigroup on $L^2(\mathbb{R}^N)$*, Transaction of the American Mathematical Society 236, 1978

[54] Hörmander L., *An Introduction to Complex Analysis in Several Variables* (3rd edition), North-Holland Mathematical Library 7, North-Holland, 1990

[55] Huang K., *Statistical Mechanics (Second Edition)*, John Wiley & Sons, 1987

[56] Hupfer T., Leschke H., Müller P., Warzel S., *Existence and Uniqueness of the Integrated Density of States for Schrödinger Operators with Magnetic Fields and Unbounded Random Potentials*, Rev. Math. Phys. 13 (2001), 1547-1581

[57] Hupfer T., Leschke H., Müller P., Warzel S., *The Absolute Continuity of the Integrated Density of States for Magnetic Schrödinger Operators with certain Unbounded Random Potentials*, Comm. Math. Phys. 221 (2001), 229-254

[58] Iftimie V., *Uniqueness and existence of the integrated density of states for the Schrödinger operators with magnetic field and electric potentials with singular negative part*, Publ. Res. Inst. Math. Sci., 41 (2) (2005), 307–327

[59] Jackson J.D., *Classical Electrodynamics Third Edition*, John Wiley & Sons, 1998

[60] Kato, T., *Perturbation theory for linear operators*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1976

[61] Kirsch, W., *Random Schrödinger operators and the density of states*, Stochastic aspects of classical and quantum systems, Lect. Notes in Math. 1109 (1985), Springer Verlag, 68–102

[62] Kirsch, W., *Random Schrödinger operators*, Lect. Notes in Phys. 345 (1989), 264-370

[63] Kirsch, W., Martinelli F., *On the ergodic properties of the spectrum of general random operators*, J. Reine Angew. Math. 335 (1982), 141–156

[64] Kirsch W., Simon B., *Comparison Theorems for The Gap of Schrödinger Operators*, J. Funct. Anal. 75 (1987), 396-410

[65] Kittel C., *Introduction to Solid States Physics*, 7th Edition, Wiley, 1996

[66] Kjeldaas T., Kohn W., *Theory of the diamagnetism of bloch electrons*, Phys. Rev. 105 (1957), 806–813

[67] Krantz S.G., Parks H.R., *A Primer of Real Analytic Functions*, Basler Lehrbücher Vol. 4, Birkhäuser Verlag, Basel-Boston-Berlin, 1992

[68] Kuchment P., *Floquet Theory for Partial Differential Equations*, Birkhäuser Verlag, Basel, 1993

[69] Kunz H., *Surface orbital magnestism*, Jour. Stat. Phys. 76 (1/2) 1994, 183–207

[70] Landau L., *Diamagnetismus der Metalle*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 64 (9-10) (1930), 629–637

[71] Landau L., Lifchitz E., *Mecanique 4ème Edition*, Editions Mir Moscou, 1981

[72] Macris N., Martin P.A., Pulé J.V., *Diamagnetic currents*, Comm. Math. Phys. 117 (1988), 215–241

[73] Macris N., Martin P.A., Pulé J.V., *Large volume asymptotics of brownian integrals and orbital magnetism*, Annales de l'I.H.P., section A, tome 66, 2 (1997), 147–183

[74] Martinelli F., Holden H., *On absence of diffusion near the bottom of the spectrum for random Schrödinger operator on* $L^2(\mathbb{R}^\nu)^+$, Comm. Math. Phys. 93 (1984), 197–217

[75] Misra P.K., Kleinman L., *Theory of the diamagnetic dusceptibility of Bloch electrons*, Phys. Rev. B 5-11 (1972), 4581–4597

[76] Misra P.K., Roth L.M., *Theory of diamagnetic dusceptibility of metals*, Phys. Rev. 177-3 (1969), 1089–1102

[77] Nenciu G., *On the surface contribution to the grand-canonical pressure of free quantum gases*, Journ. Stat. Phys. 7 (2) (1973), 119–130

[78] Nenciu G., *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields : Rigorous justification of the effective Hamiltonians*, Rev. Mod. Phy. 63 (1991), 91–128

[79] Nenciu G., *On asymptotic perturbation theory for quantum mechanics : Almost invariant subspaces and gauge invariant magnetic perturbation theory*, J. Math. Phys. 43 (3) (2002), 1273–1298

[80] Osborne M.F.M., *Number theory and the magnetic properties of an electron gas*, Phys. Rev. 88 (1952), 438–451

[81] Papapetrou A., *Über den Diamagnetismus des Elektronengases*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 106 (1-2) (1937), 9–16

[82] Papapetrou A., *Diamagnetismus des Elektronengases*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 107 (5-6) (1937), 387–392

[83] Pastur L., *Spectral properties of disordered systems in one-body approximation*, Commun. Math. Phys. 75 (1980), 179

[84] Pastur L., Figotin A., *Spectra of random and almost-periodic operators*, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften 297, Springer-Verlag Berlin, 1992

[85] Pauli W., *Über Gasentartung und Paramagnetismus*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 41 (6) (1927), 81–102

[86] Perelmuter M.A., Semenov Y.A., *On decoupling of Finite Singularities in the Scattering Theory for the Schrödinger Operator with a Magnetic Field*, J. Math. Phys. 22 (1981), 521-533

[87] Peierls E.R., *Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 80 (11-12) (1933), 763–791

[88] Peierls E.R., *Surprises in Theoretical Physics*, Princeton series in Physics, Princeton University Press, 1979

[89] Roth L.M., *Theory of Bloch electrons in a magnetic field*, J. Phys. Chem. Solids 23 (1962), 433–446

[90] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics, I : Functional Analysis*, Academic Press, San Diego, 1980

[91] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics, II : Fourier Analysis and Self-Adjointness*, Academic Press, New York, 1975

[92] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics, III : Scattering theory*, Academic Press, San Diego, 1979

[93] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics, IV : Analysis of Operators*, Academic Press, San Diego, 1978

[94] Robinson D.W., *The Thermodynamic Pressure in Quantum Statistical Mechanics*, Lecture Notes in Physics 9, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1971

[95] Ruelle D., *Statistical Mechanics - Rigorous Results*, W.A. Benjamin, New York 1969

[96] Schechter M., *Essential self-adjointness of the Schrödinger operator with magnetic vector potential*, J. Func. Anal. 20 (1975), 93–104

[97] Schechter M., *Spectra of partial differential operators*, North-Holland, Amsterdam, 1971

[98] Schoenberg D., *The magnetic properties of bismuth. III. Further measurments on the Haas-van Alphen effect*, Proc. Roy. Soc. 170 A (1939), 341–364

[99] Simon B., *Maximal and Minimal Schrödinger Forms*, J. Operator Theory 1 (1979), 37-47

[100] Simon B., *Functional Integration and Quantum Mechanics*, Academic Press, New York, 1979

[101] Simon B., *Schrödinger semigroups*, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.) 7 (1982), 447-526

[102] Skriganov M., *The spectrum band structure of the three-dimensional Schrödinger operator with periodic potential*, Inv. Math. 80 (1985), 107–121

[103] Sondheimer E.H., Wilson A.H., *The diamagnetism of free electrons*, Proc. Roy. Soc (London) A 210 (1951), 173–190

[104] Steele M.C., *Application of the theory of numbers to the magnetic properties of free electron gas*, Phys. Rev. 88 (1952), 451–464

[105] Teller E., *Der Diamagnetismus von freien Elektronen*, Zeitschrift für Physik A. Hadrons and Nuclei. 67 (1931), 311

[106] Trèves F., *Topological vector spaces, distributions and kernels*, Academic Press, New York, 1967

[107] Van Vleck J.H., *Theory of electric and magnetic susceptibilites*, Oxford Univerity Press, London, 1932

[108] Wannier G.H., Upadhyaya U.N., *Zero-field susceptibility of Bloch electrons*, Phys.Rev. 136 A (1964), 803–810

[109] Weidmann J., *Linear Operators in Hilbert Spaces*, Springer-Verlag, New York, 1980

[110] Whittaker, E.T., Watson, G.N., *A course of Modern Analysis, 4th edition*, Cambridge University Press, 1962

[111] Wilson A.H., *The Theory of Metals*, Cambridge University Press, Cambridge, 1936

[112] Zagrebnov, V., *Topics in the Theory of Gibbs Semigroup*, Leuven Notes in Mathematical and Theoretical Physics, Leuven University Press, 1978

Résumé

La majeure partie de cette thèse concerne l'étude de la susceptibilité diamagnétique en champ magnétique nul d'un gaz d'électrons de Bloch à température et densité fixées dans la limite des faibles températures. Pour les électrons libres (i.e. en l'absence de potentiel périodique), la susceptibilité diamagnétique a été calculée par L. Landau en 1930 ; le résultat est connu sous le nom de formule de Landau. Quant au cas des électrons de Bloch, E.R. Peierls montra en 1933 que dans l'approximation des électrons fortement liés, la formule pour la susceptibilité diamagnétique reste la même en remplaçant la masse de l'électron par sa "masse effective" ; ce résultat est connu sous le nom de formule de Landau-Peierls. Depuis, de nombreuses tentatives pour clarifier les hypothèses de validité de la formule de Landau-Peierls ont vu le jour. Le résultat principal de cette thèse établit rigoureusement qu'à température nulle, lorsque la densité d'électrons tend vers zéro, la contribution dominante à la susceptibilité diamagnétique est donné par la formule de Landau-Peierls avec la masse effective de la plus petite bande d'énergie de Bloch.

Mot-clefs

diamagnétisme, susceptibilité diamagnétique, susceptibilité de Landau-Peierls, électrons de Bloch, métaux, semi-conducteurs

Title

DIAMAGNETISME DES GAZ QUANTIQUES QUASI-PARFAITS

Abstract

The main part of this thesis deals with the zero-field diamagnetic susceptibility of a Bloch electrons gas at fixed temperature and fixed density in the limit of low temperatures. For a free electrons gas (that is when the periodic potential is zero), the steady diamagnetic susceptibility has been computed by L. Landau in 1930 ; the result is known as Landau formula. As for the Bloch electrons, E.R. Peierls in 1933 showed that under the tight-binding approximation, the formula for the diamagnetic susceptibility remains the same but with the mass of the electron replaced by its "effective mass" ; this result is known as the Landau-Peierls formula. Since, there were very many attempts in order to clarify the assumptions of validity of the Landau-Peierls formula. The main result of this thesis establishes rigorously that at zero temperature, as the density of electrons tends to zero, the leading contribution of the diamagnetic susceptibility is given by the Landau-Peierls formula with the effective mass of the lowest Bloch energy band.

Keywords

diamagnetism, orbital magnetism, zero-field susceptibility, Landau-Peierls susceptibility, Bloch electrons, metals, semiconductors

Adrr : Centre de Physique Théorique - Campus de Luminy, case 907 - 13288 Marseille Cedex 9
ISBN : ␣␣␣␣␣␣␣␣␣␣␣␣␣␣