Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006) 551–556
COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE
http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/

Analyse mathématique/Physique mathématique

Un théorème de décomposition pour les fonctions d'onde symétriques ou antisymétriques

François Alouges [a], Christophe Audouze [b]

[a] *Laboratoire de mathématique, bâtiment 425, université Paris-Sud, 91405 Orsay, France*
[b] *CEA-DAM/DIF/DSSI/SNEC, 91680 Bruyères-le-Châtel, France*

Reçu le 8 avril 2005 ; accepté après révision 22 février 2006

Disponible sur Internet le 20 mars 2006

Présenté par Pierre-Louis Lions

Résumé

Dans cette Note, nous prouvons un théorème de décomposition de fonctions symétriques ou antisymétriques de N variables. De telles fonctions sont utilisées en mécanique quantique pour décrire les états quantiques de bosons et de fermions respectivement. ***Pour citer cet article : F. Alouges, C. Audouze, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

Abstract

A decomposition theorem for symmetric or skew-symmetric wave functions. In this Note, we prove a theorem for the decomposition of symmetric or skew-symmetric functions of N variables. In quantum mechanics, this kind of function is commonly used for the description of quantum states of bosons and fermions respectively. ***To cite this article: F. Alouges, C. Audouze, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

Abridged English version

Let

$$L_s^2(\mathbb{R}^{3N}) = \{\phi(x_1, \ldots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}) \text{ symmetric}\},$$

and

$$L_a^2(\mathbb{R}^{3N}) = \{\phi(x_1, \ldots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}) \text{ skew-symmetric}\}.$$

The aim of this Note is to prove the following theorem.

Theorem 0.1. *Let $\phi \in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ a symmetric function of N variables $(x_1, \ldots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$. There exist a sequence of functions $(f_i)_{i\geqslant 1}$ normalized in $L^2(\mathbb{R}^3)$, $(\forall i \geqslant 1,\ \|f_i\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1)$, and a sequence $(\alpha_i)_i \in l^2$ such that*

Adresses e-mail : Francois.Alouges@math.u-psud.fr (F. Alouges), Christophe.Audouze@cea.fr (C. Audouze).

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2006.02.026

$$\phi(x_1,\ldots,x_N)=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i f_i(x_1)\cdots f_i(x_N), \tag{1}$$

$$\|\phi\|_{L^2}^2=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2. \tag{2}$$

The proof follows two steps. In a first step we build the sequence (α_k, f_k) iteratively by solving minimization problems $(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}})$ for all $k\geqslant 1$, of type (7). Here, θ_j is defined by

$$\theta_j(x_1,\ldots,x_N)=\phi(x_1,\ldots,x_N)-\sum_{i=1}^{j}\alpha_j f_j(x_1)\cdots f_j(x_N)$$

with the convention that $\theta_0=\phi$. The minimization problems are proven to have a solution by means of standard techniques, and we also get the equality

$$\forall j\geqslant 0,\quad \|\theta_j\|_{L^2}^2=\|\phi\|_{L^2}^2-\sum_{i=1}^{j}\alpha_i^2.$$

In a second step, the series $\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i f_i\cdots f_i$ is shown to converge strongly to ϕ in $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, using an estimation coming from a careful study of the sequence of Euler–Lagrange equations.

The method explained for the symmetric case also applies in the skew-symmetric one and gives a decomposition of any skew-symmetric function ϕ as

$$\phi(x_1,\ldots,x_N)=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i \det\bigl(\chi_1^i,\ldots,\chi_N^i\bigr), \tag{3}$$

$$\|\phi\|_{L^2}^2=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2, \tag{4}$$

where $(\chi_j^i)_{i,j}$ are L^2 normalized functions that satisfy $\forall i,\ \int\chi_j^i\chi_k^i=\delta_{jk}$, which is a priori different from the known decomposition in Slater's determinants since the determinants involved in (3) are not necessary orthogonal.

1. Introduction

Dans cette Note, nous considérons des fonctions symétriques ϕ de N variables (respectivement antisymétriques), c'est-à-dire vérifiant $\phi(x_1,\ldots,x_N)=\phi(x_{\sigma(1)},\ldots,x_{\sigma(N)})$ pour toute permutation σ de l'ensemble $\{1,\ldots,N\}$ (respectivement $\phi(x_1,\ldots,x_N)=(-1)^{\mathrm{sgn}(\sigma)}\phi(x_{\sigma(1)},\ldots,x_{\sigma(N)})$). De telles fonctions jouent un rôle crucial en physique quantique lorsque l'on considère des fonctions d'onde de bosons et de fermions respectivement. Pour simplifier l'exposé, les variables seront prises dans $\mathbb{R}^3$ (ce qui est le cas pertinent pour les applications), mais tous les résultats restent vrais si on les considère dans $\mathbb{R}^d$ pour d quelconque. De même, les fonctions d'onde considérées ne dépendent pas explicitement du spin et seront à valeurs réelles ; néanmoins, les méthodes ainsi que les résultats exposés ici s'étendent sans difficulté à des fonctions d'onde dépendant du spin ou à valeurs complexes.

On pose

$$L_s^2\bigl(\mathbb{R}^{3N}\bigr)=\bigl\{\phi(x_1,\ldots,x_N)\in L^2\bigl(\mathbb{R}^{3N}\bigr)\text{ symétrique}\bigr\},$$

et

$$L_a^2\bigl(\mathbb{R}^{3N}\bigr)=\bigl\{\phi(x_1,\ldots,x_N)\in L^2\bigl(\mathbb{R}^{3N}\bigr)\text{ antisymétrique}\bigr\}.$$

On propose de donner une preuve constructive au théorème suivant.

Théorème 1. *Soit $\phi\in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ une fonction symétrique de N variables $(x_1,\ldots,x_N)\in\mathbb{R}^{3N}$. Il existe une suite de fonctions $f_i\in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\|f_i\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}=1$, ainsi que des coefficients $\alpha_i\in l^2$ tels que*