Examen de M2 ANEDP (2012-13)

Méthodes variationnelles en physique quantique

(Éric Cancès & Mathieu Lewin)

17 Mai 2013

Les notes de cours sont autorisées. Il sera tenu compte de la rédaction, qui doit être concise mais précise.

Nous étudions un système composé de N bosons en interaction, qui sont confinés dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Dans la limite où le nombre de particules tend vers l'infini et où l'interaction a une faible intensité (proportionnelle à $1/N$), nous montrons que le modèle de Schrödinger à N corps converge (en un certain sens) vers le modèle non linéaire de Hartree, basé sur la fonctionnelle d'énergie

$$\mathcal{E}_{\rm H}(u) := \int_\Omega |\nabla u(x)|^2\,dx + \frac{1}{2}\int_\Omega\int_\Omega w(x-y)|u(x)|^2|u(y)|^2\,dx\,dy. \tag{1}$$

Préliminaire. Laplacien de Dirichlet sur un domaine borné.

On considère un domaine borné régulier $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. On rappelle que $H^1_0(\Omega) := \left\{u \in H^1(\Omega)\ :\ u_{|\partial\Omega} \equiv 0\right\}$ est la fermeture de $C^\infty_c(\Omega)$ dans $H^1(\Omega)$. On rappelle aussi que l'injection $H^1_0(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ est compacte puisque Ω est borné.

Question 0-a. Soit f une fonction quelconque dans $L^2(\Omega)$. Montrer que le problème de minimisation

$$\inf\left\{\frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla u(x)|^2\,dx + \frac{1}{2}\int_\Omega |u(x)|^2\,dx - \int_\Omega f(x)\,u(x)\,dx\ :\ u \in H^1_0(\Omega)\right\}$$

admet une unique solution u_0, qui vérifie l'équation

$$(-\Delta + 1)u_0 = f$$

dans $H^{-1}(\Omega)$. En utilisant le théorème de régularité elliptique, en déduire que $u_0 \in H^2(\Omega)$.

Question 0-b. Montrer que l'opérateur $-\Delta$ est auto-adjoint sur le domaine

$$\mathcal{D}(-\Delta) = H^1_0(\Omega) \cap H^2(\Omega).$$

On appelle cet opérateur le Laplacien de Dirichlet sur Ω.

Partie 1. Étude de l'énergie de Hartree.

Dans tout le problème on considère une fonction w définie sur tout $\mathbb{R}^d$, à valeurs réelles. On supposera que

$$w \in L^2(\mathbb{R}^3).$$

Parfois, on ajoutera des hypothèses sur le signe de la transformée de Fourier de w. On rappelle l'inégalité de Young

$$\|f * g\|_{L^r} \leqslant \|f\|_{L^p}\,\|g\|_{L^q} \quad \text{avec} \quad 1 + \frac{1}{r} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$$

où la convolution $f * g$ est définie par

$$f * g(x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(y)g(x-y)\,dy.$$

Question 1-a. Montrer que l'énergie $\mathcal{E}_{\rm H}$ introduite plus haut en (1) est bien définie et est fortement continue sur $H^1_0(\Omega)$.

Question 1-b. Montrer que l'ensemble

$$\mathcal{S} := \left\{ u \in H^1_0(\Omega) \ : \ \int_\Omega |u(x)|^2\, dx = 1 \right\}$$

est faiblement fermé dans $H^1_0(\Omega)$.

Question 1-c. Montrer que $\mathcal{E}_{\rm H}$ est faiblement semi-continue inférieurement sur $\mathcal{S}$ et en déduire que $\mathcal{E}_{\rm H}$ atteint son minimum sur cet ensemble.

Question 1-d. Montrer que $\mathcal{E}_{\rm H}(|u|) = \mathcal{E}_{\rm H}(u)$ et en déduire qu'il existe un minimiseur u_0 positif.

Question 1-e. Montrer que u_0 est solution de l'équation

$$\left(-\Delta + |u_0|^2 * w\right) u_0 = \lambda u_0 \tag{2}$$

dans $H^{-1}(\Omega)$, le dual de $H^1_0(\Omega)$.

Question 1-f. Montrer que $w * |u_0|^2 \in L^\infty(\Omega)$. En déduire que l'opérateur $-\Delta + |u_0|^2 * w$ est auto-adjoint sur le même domaine que le Laplacien de Dirichlet, et qu'il est borné inférieurement. Montrer enfin que $u_0 \in H^2(\Omega)$.

Question 1-g. Montrer que le spectre essentiel de l'opérateur $-\Delta + |u_0|^2 * w$ est vide (on pourra utiliser une suite de Weyl). En déduire que le spectre de $-\Delta + |u_0|^2 * w$ est constitué d'une suite de valeurs propres isolées de multiplicité finie, qui tendent vers $+\infty$.

Question 1-h. Montrer que la première valeur propre de $-\Delta + |u_0|^2 * w$ est non-dégénérée et que l'unique fonction propre associée est positive. En déduire que u_0 est cette fonction propre.

Question 1-i. On rappelle que $\widehat{f * g} = (2\pi)^{d/2} \widehat{f}\, \widehat{g}$. Montrer que pour tout $u \in H^1_0(\Omega)$,

$$\int_\Omega \int_\Omega w(x-y) |u(x)|^2 |u(y)|^2 \, dx\, dy = (2\pi)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{\rho}(k)|^2 \widehat{w}(k)\, dk$$

où $\rho(x) = |u_0(x)|^2 \mathbb{1}_\Omega(x)$.

Question 1-j. Montrer que si $\widehat{w} > 0$, alors $\mathcal{E}_{\rm H}$ possède un unique minimiseur (au signe près) sur l'ensemble $\mathcal{S}$.

Question 1-k. En supposant toujours $\widehat{w} > 0$, montrer que toute suite minimisante $u_n \geqslant 0$ sur $\mathcal{S}$ converge fortement dans $H^1_0(\Omega)$ vers u_0.

Partie 2. Étude du modèle à N corps.

Dans cette partie on étudie le Hamiltonien à N corps

$$H_{N,\varepsilon} := \sum_{j=1}^N (-\Delta)_{x_j} + \varepsilon \sum_{1 \leqslant k < \ell \leqslant N} w(x_k - x_\ell). \tag{3}$$

On ne fait pas d'hypothèse particulière sur $\widehat{w}$ mais on suppose toujours $w \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

Question 2-a. Quelle est la frontière de l'ensemble Ω^N ? Rappeler pour quelle raison physique on doit se restreindre aux fonctions d'onde symétriques. Montrer que l'espace

$$\mathcal{D}_N := \left\{ \Psi \in H^1_0(\Omega^N) \cap H^2(\Omega^N) \ : \ \Psi \text{ est symétrique} \right\}$$

est fermé dans $H^1_0(\Omega^N) \cap H^2(\Omega^N)$ pour la norme associée. Prouver ensuite que l'opérateur

$$-\Delta = \sum_{j=1}^{N} (-\Delta)_{x_j}$$

est auto-adjoint sur $\mathcal{D}_N$.

Question 2-b. Montrer que $H_{N,\varepsilon}$ est auto-adjoint sur $\mathcal{D}_N$.

Question 2-c. Montrer que le spectre de $H_{N,\varepsilon}$ est constitué d'une suite de valeurs propres de multiplicité finie, qui tendent vers $+\infty$.

Question 2-d. Soit $u \in H^2(\Omega) \cap H^1_0(\Omega)$ telle que $\int_\Omega |u(x)|^2 \, dx = 1$, et

$$\Psi(x_1, ..., x_N) = u(x_1) \cdots u(x_N).$$

Montrer que $\Psi \in \mathcal{D}_N$ et calculer $\langle \Psi, H_{N,\varepsilon} \Psi \rangle$.

Partie 3. Preuve de la validité du modèle de Hartree à la limite $N \to \infty$.

Dans cette dernière partie, on prend

$$\varepsilon = \frac{1}{N-1}$$

et on note pour simplifier

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} (-\Delta)_{x_j} + \frac{1}{N-1} \sum_{1 \leqslant k < \ell \leqslant N} w(x_k - x_\ell).$$

On appelle $E(N) := \inf \sigma(H_N)$ la première valeur propre de H_N.

Question 3-a. En utilisant le calcul de la question 2-d, montrer que

$$\frac{E(N)}{N} \leqslant \inf_{u \in \mathcal{S}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}(u).$$

L'objectif de cette dernière partie est de démontrer que

$$\lim_{N \to \infty} \frac{E(N)}{N} = \inf_{u \in \mathcal{S}} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}(u).$$

Nous allons maintenant ajouter l'hypothèse que

$$\widehat{w} > 0 \qquad \text{et} \qquad \widehat{w} \in L^1(\mathbb{R}^d). \tag{4}$$

Question 3-b. Rappeler pourquoi w est une fonction continue.

Question 3-c. Soient $\rho_1, \rho_2 \in C^\infty_c(\mathbb{R}^d)$. En utilisant (4), montrer que

$$\frac{1}{2} \int_\Omega \int_\Omega w(x-y) \rho_1(x) \rho_1(y) \, dx \, dy \geqslant \int_\Omega \int_\Omega w(x-y) \rho_1(x) \rho_2(y) \, dx \, dy \\ - \frac{1}{2} \int_\Omega \int_\Omega w(x-y) \rho_2(x) \rho_2(y) \, dx \, dy$$

Question 3-d. On fixe des points $x_1, ..., x_N \in \mathbb{R}^d$. Prendre une suite $\rho_{1,n}$ qui tend vers la mesure $\sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$ et en déduire que

$$\sum_{1\leqslant k<\ell\leqslant N} w(x_k - x_\ell) \geqslant -\frac{N}{2}w(0) + \sum_{j=1}^{N} \big(w * \rho_2\big)(x_j) \\ -\frac{1}{2}\int_\Omega\int_\Omega w(x-y)\rho_2(x)\rho_2(y)\,dx\,dy,$$

pour toute fonction ρ_2.

Question 3-e. Montrer que pour toute fonction Ψ dans $\mathcal{D}_N$ avec $\|\Psi\|_{L^2(\Omega^N)} = 1$, on a

$$\frac{1}{N-1}\int_\Omega dx_1 \cdots \int_\Omega dx_N \sum_{1\leqslant k<\ell\leqslant N} w(x_k - x_\ell)|\Psi(x_1, ..., x_N)|^2 \\ \geqslant -\frac{N}{2(N-1)}w(0) + \frac{N^2}{2(N-1)}\int_\Omega\int_\Omega w(x-y)\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)\,dx\,dy$$

où ρ_Ψ est la densité du système (normalisée à 1) :

$$\rho_\Psi(x) = \int_\Omega dx_2 \cdots \int_\Omega dx_n\, |\Psi(x, x_2, ..., x_N)|^2.$$

Question 3-f. Montrer qu'on a l'inégalité

$$\sum_{j=1}^N \int_\Omega dx_1 \cdots \int_\Omega dx_N |\nabla_{x_j}\Psi(x_1, ..., x_N)|^2 \geqslant N\int_\Omega |\nabla\sqrt{\rho_\Psi}(x)|^2\,dx$$

pour toute fonction $\Psi \in H^1(\Omega^N)$ symétrique.

Question 3-g. Montrer que pour toute fonction Ψ dans le domaine de H_N, on a

$$\frac{\langle\Psi, H_N\Psi\rangle}{N} \geqslant \mathcal{E}_{\mathrm{H}}(\sqrt{\rho_\Psi}) - \frac{w(0)}{2(N-1)}.$$

et conclure que

$$\lim_{N\to\infty}\frac{E(N)}{N} = \inf_{u\in\mathcal{S}}\mathcal{E}_{\mathrm{H}}(u).$$

Question 3-h. Pour tout N on considère une fonction propre Ψ_N associée à la première valeur propre $E(N)$ de H_N. Montrer que $\sqrt{\rho_{\Psi_N}} \to u_0$ fortement dans $H^1_0(\Omega)$, où on rappelle que u_0 est l'unique minimiseur positif de $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$, construit à la partie 1.