Université Pierre et Marie Curie – Paris 6 | Examen semestriel
Master deuxième année | Simulation moléculaire
12 juin 2006 | 9h00 à 12h00

Avertissement : *Il sera tenu grand compte de la rigueur et de la précision des arguments.*

On considère un solide dont les noyaux sont répartis sur le réseau périodique $\mathbb{Z}^3$. L'objet du problème est l'étude d'un modèle de structure éléctronique dit "sans orbitales", que l'on peut écrire sous la forme suivante (ϕ est la fonction d'onde des électrons, à valeurs réelles) :

$$\inf \left\{ E_K(\phi) + \int_Q V\phi^2, \quad \phi \in H^1_{\rm per}, \quad \int_Q \phi^2 = N \right\}, \tag{1}$$

où E_K est l'énergie cinétique du système électronique défini par ϕ, V est le potentiel engendré par les noyaux. En première approximation, on le supposera régulier (et périodique). $Q = \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ est le cube unité, et $H^1_{\rm per}$ est l'espace des fonctions $H^1_{\rm loc}$ qui sont $\mathbb{Z}^3$-périodiques. N est le nombre d'électrons par cellule. La fonctionnelle E_K modélise l'énergie cinétique des électrons, et est donnée par

$$E_K(\phi) = \frac{1}{2}\int_Q |\nabla\phi|^2 + \int_Q |\phi|^{10/3} + \int_Q \int_{\mathbb{R}^3} w\,(x-y)\,|\phi(x)|^{5/3}|\phi(y)|^{5/3} dxdy. \tag{2}$$

La distribution w, définie sur $\mathbb{R}^3$, est définie par l'intermédiaire de sa transformée de Fourier :

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^3, \qquad \widehat{w}(\xi) = \alpha\left(\frac{|\xi|}{2k_F}\right)$$

où $k_F = \left(3\pi^2\right)^{1/3}$ est appelé vecteur d'onde de Fermi, et où α est une fonction continue de $\mathbb{R}^+$ à valeurs dans $[0, -2]$ telle que

$$\alpha(0) = 0, \quad \text{et} \quad \lim_{t\to+\infty} \alpha(t) = -2.$$

La convention de normalisation utilisée pour la transformée de Fourier est la suivante : $\forall f \in L^1(\mathbb{R}^3)$,

$$\hat{f}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x)\, e^{-ix\cdot\xi}\, dx.$$

On notera également, pour toute fonction continue périodique ϕ,

$$\forall k \in \mathbb{Z}^3, \quad c_k(\phi) = \int_Q \phi(x) e^{-2i\pi kx} dx,$$

les coefficients de Fourier de ϕ. On rappelle de plus la formule de Poisson : pour toute distribution T de $\mathbb{R}^3$,

$$\sum_{j\in\mathbb{Z}^3} T(x-j) = \sum_{k\in\mathbb{Z}^3} \widehat{T}(2\pi k) e^{2i\pi kx}.$$

Première partie

1. Dans cette question, on suppose que ϕ est périodique et de classe C^∞.
   (a) Démontrer que

$$E_K(\phi) = \frac{1}{2}\int_Q |\nabla\phi|^2 + \int_Q |\phi|^{10/3} + \sum_{j\in\mathbb{Z}^3} \int_Q \int_Q w(x-y+j)|\phi(x)|^{5/3}|\phi(y)|^{5/3}.$$

(b) En déduire que

$$E_K(\phi) = \frac{1}{2}\int_Q |\nabla\phi|^2 + \int_Q |\phi|^{10/3} + \sum_{k\in\mathbb{Z}^3} \alpha\left(\frac{\pi|k|}{k_F}\right)\left|c_k\left(|\phi|^{5/3}\right)\right|^2.$$

2. Démontrer que la fonctionnelle E_K est bien définie sur H^1_{per}.
3. On considère une fonction u de classe C^∞ telle que son support soit inclus dans Q, et $\int u^2 = N$. On pose

$$\forall\sigma\geq 1,\quad u_\sigma(x) = \sigma^{3/2}u(\sigma x),\quad \phi_\sigma(x) = \sum_{j\in\mathbb{Z}^3} u_\sigma(x-j).$$

(a) Démontrer que ϕ_σ est une fonction test du problème de minimisation (1), et que

$$E_K(\phi_\sigma) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\sigma|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |u_\sigma|^{10/3} + \sum_{k\in\mathbb{Z}^3} \alpha\left(\frac{\pi|k|}{k_F}\right)\left|\widehat{|u_\sigma|^{5/3}}(k)\right|^2.$$

(b) Calculer $\displaystyle\lim_{\sigma\to+\infty} \frac{1}{\sigma^2}E_K(\phi_\sigma)$ en fonction de u.

(c) En déduire que si u vérifie $\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u|^2 - \int_{\mathbb{R}^3}|u|^{10/3} < 0$, alors l'infimum défini par (1) vaut $-\infty$.

4. On note

$$K = \inf\left\{\frac{\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u|^2}{\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}|u|^{10/3}},\quad u\in H^1(\mathbb{R}^3),\quad \int_{\mathbb{R}^3} u^2 = 1\right\}. \tag{3}$$

et

$$N_0 = \left(\frac{K}{2}\right)^{3/2}.$$

5. Montrer que pour tout $\phi\in H^1_{\mathrm{per}}$,

$$E_K(\phi) \geq \frac{1}{2}\int_Q |\nabla\phi|^2 - \int_Q |\phi|^{10/3}.$$

6. Démontrer que si $N > N_0$, alors l'infimum défini par (1) vaut $-\infty$.
7. Démontrer que si $N < N_0$, alors (1) admet un minimiseur.
8. On suppose que le problème (3) admet un minimiseur u_0. Montrer qu'on peut supposer $u_0 \geq 0$ presque partout sur $\mathbb{R}^3$, et écrire l'équation d'Euler-Lagrange vérifiée par u_0.
9. Montrer que u_0 est de classe C^∞ et est strictement positif sur $\mathbb{R}^3$.

Deuxième partie

On s'intéresse dans cette partie au cas où $N < N_0$, et on note ϕ_0 une solution de (1). Dans la suite, pour tout $\phi\in H^1_{\mathrm{per}}$, on note $L[\phi]$ la forme linéaire sur H^1_{per} définie par

$$L[\phi]h = \frac{5}{3}\sum_{k\in\mathbb{Z}^3}\alpha\left(\frac{|k|}{2k_F}\right)\left[\overline{c_k\left(|\phi|^{-1/3}\phi h\right)}c_k\left(|\phi|^{5/3}\right) + c_k\left(|\phi|^{-1/3}\phi h\right)\overline{c_k\left(|\phi|^{5/3}\right)}\right].$$

On identifiera, grâce au théorème de représentation de Riesz, cette forme linéaire à son représentant, de sorte que $L[\phi]\in H^1_{\mathrm{per}}$.

1. À l'aide de $L[\phi_0]$, écrire l'équation d'Euler-Lagrange vérifiée par ϕ_0. On notera μ_0 le multiplicateur associé à la contrainte de masse dans (1).

2. Vérifier que si $V = V_0$ est constant, alors $\phi_0 = \sqrt{N}$ est une fonction test de (1) qui est solution de l'équation d'Euler-Lagrange de la question précédente, pour une valeur μ_0 du multiplicateur que l'on précisera.

Dans la suite, on s'intéresse à l'existence d'une solution de l'équation d'Euler-Lagrange proche de cette constante pour V proche (en un sens à préciser) de la constante V_0. Pour cela, on rappelle le théorème des fonctions implicites :

Théorème des fonctions implicites *Soient E, F, G des espaces de Banach, et soit $\mathcal{F}$ une application de $E \times F$ dans G de classe C^1. On suppose que le couple $(x_0, y_0) \in E \times F$ est une solution de $\mathcal{F}(x_0, y_0) = 0$ et que $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x}(x_0, y_0)$ est un isomorphisme de E dans G. Alors il existe un voisinage V de y_0 dans F et un voisinage U de x_0 dans E, et une application g de V dans U de classe C^1 telle que*

$$\forall y \in V, \quad y \quad \text{est l'unique solution de} \quad \mathcal{F}(g(y), y) = 0 \quad \text{dans} \quad U.$$

3. On définit

$$\begin{array}{rccc} \mathcal{F} \ : & \left(H^1_{\mathrm{per}}(Q) \times \mathbb{R}\right) \times L^{3/2}(Q) & \longrightarrow & \left(H^{-1}_{\mathrm{per}}(Q) \times \mathbb{R}\right) \\ & ((\phi, \mu), V) & \longmapsto & \left(-\dfrac{1}{2}\Delta\phi + \dfrac{5}{3}|\phi|^{4/3}\phi + V\phi + L[\phi] - \mu\phi, \displaystyle\int_Q \phi^2 - N\right). \end{array}$$

On admet que $\mathcal{F}$ est de classe C^1. Démontrer que la dérivée partielle de $\mathcal{F}$ par rapport au couple (ϕ, μ) au point $\left(\left(\sqrt{N}, \mu_0\right), V_0\right)$ est égale à

$$\left.\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \phi}\right|_{((\sqrt{N}, \mu_0), V_0)} \cdot (h) = \left(B(h, \cdot), 2\sqrt{N}\int_Q h\right),$$

$$\left.\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu}\right|_{((\sqrt{N}, \mu_0), V_0)} = (-\sqrt{N}, 0),$$

où B est la forme bilinéaire définie sur H^1_{per} par

$$B(h,g) = \frac{1}{2}\int_Q \nabla h \nabla g + \frac{20}{9}N^{2/3}\int_Q hg + \frac{25}{9}N^{2/3}\sum_{k \in \mathbb{Z}^3} \alpha\left(\frac{\pi|k|}{k_F}\right)\left(c_k(g)\overline{c_k(h)} + \overline{c_k(g)}c_k(h)\right).$$

4. On suppose que la fonction α vérifie

$$\exists \gamma > 0 \quad \text{tel que} \quad \forall \eta \in \mathbb{R}, \quad \alpha(\eta) \geq -\eta^2.$$

En déduire qu'il existe $\gamma > 0$ tel que

$$\forall h \in H^1_{\mathrm{per}}, \quad B(h,h) \geq \frac{10}{9}\frac{k_F^2}{(3\pi^2)^{2/3}}\int_Q h^2 + \gamma\int_Q |\nabla h|^2.$$

5. Démontrer qu'il existe $\varepsilon > 0$ et $\delta > 0$ tels que pour tout $V \in L^{3/2}(Q)$ tel que $\|V - V_0\|_{L^{3/2}(Q)} < \delta$, il existe un unique couple $(\phi, \mu) \in H^1_{\mathrm{per}}(Q) \times \mathbb{R}$ solution de $\mathcal{F}(\phi, \mu) = 0$ vérifiant $\|\phi - \sqrt{N}\|_{H^1_{\mathrm{per}}} + |\mu - \mu_0| \leq \varepsilon$.