# Méthodes variationnelles en physique quantique

# M2 ANEDP

# Examen du 5 mai 2014

## Partie I : Théorie spectrale.

**Question 1 (théorème de Wiener).** Soit $\mu$ une mesure borélienne positive sur $\mathbb{R}$ telle que $\mu(\mathbb{R}) < \infty$ et

$$A_\mu = \{x \in \mathbb{R} \mid \mu(\{x\}) > 0\}$$

l'ensemble des atomes de $\mu$. On rappelle que si $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite de fonctions boréliennes bornées de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ qui converge simplement sur $\mathbb{R}$ vers une fonction $f$, on a

$$\lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}} f_n(x)\, d\mu(x) = \int_{\mathbb{R}} f(x)\, d\mu(x) = \sum_{x\in A_\mu} f(x)\mu(\{x\}) + \int_{\mathbb{R}} f(x)\, d\mu_{\mathrm{c}}(x),$$

où $\mu_{\mathrm{c}}$ est la partie continue de la mesure $\mu$, et que $\int_{\mathbb{R}} f(x)\, d\mu_{\mathrm{c}}(x) = 0$ si la fonction $f$ est nulle en dehors de l'ensemble $A_\mu$.

Soit

$$\widehat{\mu}(t) = \int_{\mathbb{R}} e^{-itx}\, d\mu(x).$$

la transformée de Fourier de $\mu$.

**1a.** Vérifier que

$$\frac{1}{T}\int_0^T |\widehat{\mu}(t)|^2\, dt = \frac{1}{2T}\int_{-T}^T |\widehat{\mu}(t)|^2\, dt = \int_{\mathbb{R}^2} K_T(x-y)\, d\mu(x)\, d\mu(y),$$

où $K_T$ est une fonction paire de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ que l'on précisera.

**1b.** Montrer que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \lim_{T\to+\infty} \int_{\mathbb{R}} K_T(x-y)\, d\mu(y) = \mu(\{x\}).$$

**1c.** En déduire que

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T |\widehat{\mu}(t)|^2\, dt = \sum_{x\in A_\mu} |\mu(\{x\})|^2.$$

**Question 2.** Soit $H$ un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$. On note $(\cdot,\cdot)_{\mathcal{H}}$ le produit scalaire de $\mathcal{H}$, $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ l'espace des applications linéaires continues sur $\mathcal{H}$ et $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ l'espace des opérateurs compacts $\mathcal{H}$.

**2a.** Soit $(\Pi^H_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ la mesure spectrale associée à $H$, $\psi \in \mathcal{H}$ et $t \in \mathbb{R}$. Exprimer $(\psi, e^{-itH}\psi)_{\mathcal{H}}$ en fonction de $(\Pi^H_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$, $\psi$ et $t$.

**2b.** On suppose dans cette question (et dans cette question seulement) que le spectre ponctuel de $H$ est vide ($\sigma_{\mathrm{p}}(H) = \emptyset$). En utilisant les résultats des questions 1 et 2a, montrer que pour tout $\psi \in \mathcal{H}$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T |\langle\psi|e^{-itH}\psi\rangle|^2\,dt = 0.$$

En déduire successivement les résultats suivants :

i) pour tout $(\phi,\psi) \in \mathcal{H}\times\mathcal{H}$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T |\langle\phi|e^{-itH}\psi\rangle|^2\,dt = 0;$$

ii) pour tout opérateur $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ de rang fini et pour tout $\psi \in \mathcal{H}$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \|Ke^{-itH}\psi\|^2\,dt = 0.$$

iii) pour tout opérateur compact $K \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ et pour tout $\psi \in \mathcal{H}$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \|Ke^{-itH}\psi\|^2\,dt = 0.$$

**2c.** On note $\mathcal{H}_p$ l'espace de Hilbert engendré par tous les vecteurs propres de $H$ et $\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_p^\perp$. Montrer que $\mathcal{H}_p$ et $\mathcal{H}_c$ sont stables par $H$ en ce sens que

$$D(H) = (\mathcal{H}_p \cap D(H)) \oplus (\mathcal{H}_p \cap D(H))$$

et que

$$\forall u \in \mathcal{H}_p \cap D(H),\ Hu \in \mathcal{H}_p \qquad \text{et} \qquad \forall u \in \mathcal{H}_c \cap D(H),\ Hu \in \mathcal{H}_c.$$

Vérifier que le spectre ponctuel de $H|_{\mathcal{H}_c}$ est vide. Le spectre continu de $H|_{\mathcal{H}_p}$ est-il vide en général ?

**2d.** Montrer que tout opérateur compact $K \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ et tout $\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{c}}$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \|Ke^{-itH}\psi\|^2\,dt = 0.$$

**2e.** Soit $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ un opérateur $H$-compact (c'est-à-dire tel que $K(H+i)^{-1} \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$). Montrer que pour tout $\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{c}} \cap D(H)$,

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \|Ke^{-itH}\psi\|^2\,dt = 0.$$

*Indication : remarquer que pour tout $\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{c}} \cap D(H)$, $(H+i)\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{c}}$.*

Vérifier que le résultat reste vrai pour tout $\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{c}}$.

**Question 3.** Un opérateur auto-adjoint $H$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ est dit localement compact si

$$\forall f \in L^\infty(\mathbb{R}^d), \text{ t.q. } \lim_{|x|\to+\infty} f(x) = 0, \; f(x)(z-H)^{-1} \in \mathcal{K}(L^2(\mathbb{R}^d)), \; \forall z \in \rho(H), \tag{1}$$

où $\rho(H)$ désigne l'ensemble résolvant de $H$, autrement dit si pour toute fonction $f$ (essentiellement) bornée et tendant vers 0 à l'infini, l'opérateur de multiplication par $f$ est $H$-compact.

**3a.** Soit $H$ un opérateur auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ tel qu'il existe deux constantes réelles positives $a$ et $b$ telles que

$$-\Delta \leq aH + b \tag{2}$$

(i.e. telles que pour tout $\phi \in D(H)$, $\|\nabla\phi\|_{L^2}^2 \leq a\langle\phi|H|\phi\rangle + b\|\phi\|_{L^2}^2$). Montrer que $H$ est localement compact.

**3b.** Soit $V \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ une fonction telle que l'opérateur de multiplication par $V$ soit $-\Delta$-borné de borne relative égale à 0. Déduire de la question précédente que l'opérateur de Schrödinger $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ de domaine $H^2(\mathbb{R}^d)$ est localement compact. En déduire que l'Hamiltonien de l'atome d'Hydrogène

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{|x|} \quad \text{sur } L^2(\mathbb{R}^3)$$

est localement compact.

**3c.** Démontrer le résultat suivant.

**Theorem 1** (RAGE : Ruelle, Amrein, Georgescu, Enss)**.** *Soit $H$ un opérateur auto-adjoint localement compact sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. On note $\mathcal{H}_p$ l'espace de Hilbert engendré par tous les vecteurs propres de $H$ et $\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_p^\perp$. Soit $\chi_{B_R}$ la fonction caractéristique de la boule $B_R = \left\{x \in \mathbb{R}^d \mid |x| < R\right\}$. On a*

$$(\phi_0 \in \mathcal{H}_p) \quad \Leftrightarrow \quad \forall\epsilon > 0, \; \exists R > 0, \; \forall t \geq 0, \; \left\|(1-\chi_{B_R})e^{-itH}\phi_0\right\|_{L^2} \leq \epsilon; \tag{3}$$

$$(\phi_0 \in \mathcal{H}_c) \quad \Leftrightarrow \quad \forall R > 0, \; \lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \left\|\chi_{B_R}e^{-itH}\phi_0\right\|_{L^2}^2 \, dt = 0. \tag{4}$$

**3d.** Proposer une interprétation physique du théorème RAGE.

## Partie II : Méthodes variationnelles

Pour $\Omega$ ouvert de $\mathbb{R}^d$, on note $L^p(\Omega, \mathbb{C})$ l'espace des fonctions $L^p$ sur $\Omega$ à valeurs dans $\mathbb{C}$, et $L^p(\Omega, \mathbb{R})$ l'espace des fonctions $L^p$ sur $\Omega$ à valeurs dans $\mathbb{R}$. On utilisera le même genre de notation pour les espaces de Sobolev.

**Question 4.** Soit $\Omega$ un ouvert borné, régulier, simplement connexe de $\mathbb{R}^3$ et

$$X = \left\{\mathbf{A} \in (H^1(\Omega))^d \mid \forall\phi \in H^1(\Omega), \; \int_\Omega \mathbf{A}\cdot\nabla\phi = 0\right\}.$$

On admet de résultat suivant :

**Proposition 1.** *Soit $\Omega$ un ouvert borné, régulier, simplement connexe de $\mathbb{R}^3$. L'opérateur rotationnel définit un isomorphisme bicontinu de $X$, muni de la norme $H^1$, dans $(L^2(\Omega))^3$.*

Soit $\mathbf{B}_0 \in (L^2(\Omega))^3$. On définit sur $H^1(\Omega, \mathbb{C}) \times X$ la fonctionnelle

$$E(u, \mathbf{A}) = \int_\Omega |(-i\nabla + \mathbf{A})u|^2 + \int_\Omega \left(|u|^2 - 1\right)^2 + \int_\Omega |\mathbf{B}_0 - \mathrm{rot}(\mathbf{A})|^2,$$

et on considère le problème d'optimisation

$$\inf_{(u,\mathbf{A}) \in H^1(\Omega,\mathbb{C}) \times X} E(u, \mathbf{A}). \tag{5}$$

Soit $((u_n, \mathbf{A}_n))_{n\in\mathbb{N}}$ une suite minimisante pour (5).

**4a.** En utilisant la Proposition 1, montrer que la suite $(\mathbf{A}_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bornée dans $X$.

**4b.** Montrer que la suite $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bornée dans $L^4(\Omega, \mathbb{C})$.

**4c.** Déduire des questions 4a et 4b que la suite $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bornée dans $H^1(\Omega, \mathbb{C})$.

**4d.** Montrer que le problème (5) admet un minimiseur.

**Question 5.** Soit

$$V = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}) \mid \int_{\mathbb{R}^2} |\mathbf{r}|^2 |u(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} < \infty \right\}.$$

Soit $\Omega \in \mathbb{R}_+$ et $\mathbf{A}$ le champ de vecteurs sur $\mathbb{R}^2$ défini par $\mathbf{A}_\Omega(\mathbf{r}) = -\Omega y \mathbf{e}_x + \Omega x \mathbf{e}_y$, $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$ désignant une base orthonormale de $\mathbb{R}^2$ et $x$ et $y$ les coordonnées cartésiennes du point $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^2$ dans cette base ($\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y$). Pour $u \in V$ on pose

$$F_\Omega(u) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} |(-i\nabla + \mathbf{A}_\Omega)u|^2 + \frac{1}{2}(1 - \Omega^2) \int_{\mathbb{R}^2} |\mathbf{r}|^2 |u(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} + \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^2} |u|^4,$$

et on considère le problème d'optimisation

$$I_\Omega = \inf \left\{ F_\Omega(u), \ u \in V, \ \int_{\mathbb{R}^2} |u|^2 = 1 \right\}. \tag{6}$$

**5a.** Montrer que si $0 \leq \Omega < 1$, le problème (6) admet un minimiseur.

> *Indication : considérer une suite minimisante $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ pour (6) et utiliser le fait que $\int_{\mathbb{R}^2} |\mathbf{r}|^2 |u_n(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} \leq C$ pour montrer qu'il ne peut pas y avoir de perte de masse à l'infini lorsqu'on passe à la limite dans la contrainte $\int_{\mathbb{R}^2} |u_n|^2 = 1$.*

**5b.** Montrer que si $\Omega > 1$, alors $I_\Omega = -\infty$.

> *Indication : travailler en coordonnées polaires $(r, \theta)$, remarquer que $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \Omega r \mathbf{e}_\theta$, et calculer $E(u_{\alpha,k})$ et $\int_{\mathbb{R}^2} |u_{\alpha,k}|^2$ pour la famille de fonctions $(u_{\alpha,k})_{\alpha>0,\, k\in\mathbb{Z}}$ où*
>
> $$u_{\alpha,k}(\mathbf{r}) = \alpha f(\alpha r) \, e^{ik\theta},$$
>
> *avec $f \in C^\infty(\mathbb{R}_+, \mathbb{R})$ à support compact, nulle en 0, et telle que $2\pi \displaystyle\int_0^{+\infty} r f(r)^2 \, dr = 1$.*