Examen de M2 ANEDP (2014-15)

Théorie spectrale et méthodes variationnelles

(Éric Cancès & Mathieu Lewin)

12 Mai 2015

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

L'objectif de ce problème est d'étudier l'atome d'hydrogène couplé à un champ électromagnétique classique, qui représente les photons.

On rappelle que, pour un champ de vecteur $A : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$

$$\operatorname{div} A = \nabla \cdot A = \partial_{x_1} A_1 + \partial_{x_2} A_2 + \partial_{x_3} A_3,$$

$$\operatorname{rot} A = \nabla \wedge A = \begin{pmatrix} \partial_{x_2} A_3 - \partial_{x_3} A_2 \\ \partial_{x_3} A_1 - \partial_{x_1} A_3 \\ \partial_{x_1} A_2 - \partial_{x_2} A_1 \end{pmatrix}.$$

Partie 1. Champs à divergence nulle.

Un champ magnétique, d'énergie finie, est une fonction $B \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ dont l'énergie est précisément

$$\frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |B(x)|^2 \, dx,$$

et qui vérifie, au sens des distributions, $\operatorname{div} B = 0$. On montre ici qu'il existe une unique fonction $A \in L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ telle que $B = \operatorname{rot} A$ et $\operatorname{div} A = 0$. Le champ A s'appelle le *potentiel vecteur* et la condition $\operatorname{div} A = 0$ s'appelle la *jauge de Coulomb*.

Question 1-a. Soit $B \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ tel que $\operatorname{div} B = 0$ au sens des distributions. Montrer que $k \cdot \widehat{B}(k) = 0$ pour tout $k \in \mathbb{R}^3$.

Question 1-b. Soit A défini par sa tranformée de Fourier $\widehat{A}(k) = \frac{k}{i|k|^2} \wedge \widehat{B}(k)$. Montrer que $A \in L^{6-\varepsilon}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) + L^{6+\varepsilon}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ pour tout $\varepsilon > 0$, que $\operatorname{rot} A = B$ et que $\operatorname{div} A = 0$. On pourra utiliser le fait que la transformée de Fourier de $x|x|^{-3}$ est proportionnelle à $k|k|^{-2}$.

Question 1-c. En utilisant l'inégalité de Sobolev, montrer que $A \in L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ et qu'il existe une constante universelle C telle que

$$\|A\|_{L^6} \leqslant C \, \|B\|_{L^2} .$$

Montrer que A est l'unique champ de vecteur de $L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ tel que $B = \operatorname{rot} A$ et $\operatorname{div} A = 0$.

Partie 2. Modèle avec couplage minimal.

Dans cette partie, nous considérons un modèle simplifié, dit à *couplage minimal*, et montrons que son état fondamental est le même qu'en l'absence de champ. L'énergie correspondante a la forme

$$\mathcal{E}_{\rm cm}(\varphi, A) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |-i\nabla\varphi(x) + \sqrt{\alpha} A(x) \varphi(x)|^2 \, dx - \kappa \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2}{|x|} \, dx + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |\operatorname{rot} A(x)|^2 \, dx$$

où $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ est la fonction d'onde de l'électron, supposée normalisée :

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2 = 1.$$

Ici $\alpha = e^2 \simeq 1/137$ est le carré de la charge de l'électron et $\kappa = e^2 Z$ où Z est le nombre de protons dans le noyau ($Z = 1$ pour l'atome d'hydrogène). Dans la suite, α et κ sont des paramètres indépendants et strictement positifs.

Question 2-a. Expliquer rapidement pourquoi on ne peut pas éliminer les constantes physiques dans ce modèle.

Question 2-b. Montrer que $\mathcal{E}_{\rm cm}(e^{i\sqrt{\alpha}\chi}\varphi, A - \nabla\chi) = \mathcal{E}_{\rm cm}(\varphi, A)$ pour toute fonction χ (on pourra supposer que toutes les fonctions sont assez lisses). On parle *d'invariance de jauge* et ceci mène à ajouter la condition $\operatorname{div} A = 0$.

Question 2-c. Montrer que $\mathcal{E}_{\rm cm}$ est bien définie et continue sur l'espace

$$\tilde{\mathcal{X}} = \left\{(\varphi, A) \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \times L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \ : \ \operatorname{rot} A \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3),\ \operatorname{div} A = 0\right\}.$$

On s'intéresse alors au problème de minimisation

$$I_{\rm cm}(\alpha, \kappa) := \inf_{\substack{(\varphi, A) \in \tilde{\mathcal{X}} \\ \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2 = 1}} \mathcal{E}_{\rm cm}(\varphi, A).$$

Question 2-d. En écrivant $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$ et en optimisant par rapport à A, montrer que l'on a

$$|-i\nabla\varphi(x) + A(x)\varphi(x)|^2 \geqslant |\nabla|\varphi|(x)|^2$$

presque partout. Conclure que $I_{\rm cm}(\alpha, \kappa) = I_{\rm cm}(0, \kappa)$. Quel sont les minimiseurs du problème ?

Partie 3. Modèle avec couplage spinoriel : stabilité.

En réalité, il existe un couplage entre le spin de l'électron et le champ magnétique B. Dans cette partie nous ajoutons ce terme et montrons que l'atome d'hydrogène peut être déstabilisé par un couplage trop fort (plus précisément, lorsque $\alpha\kappa$ est trop grand).

Le spin de l'électron est une variable interne qui peut prendre les deux valeurs $\uparrow$ et $\downarrow$, et la fonction d'onde de l'électron est alors une fonction $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ à valeurs dans $\mathbb{C}^2$, telle que

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 = 1.$$

L'interprétation est que $|\varphi_1(x)|^2$ est la densité de probabilité que l'électron soit en $x \in \mathbb{R}^3$ avec spin $\uparrow$ et $|\varphi_2(x)|^2$ est la densité de probabilité qu'il soit en $x \in \mathbb{R}^3$ avec spin $\downarrow$. À tout état φ, On associe alors un vecteur $S(x)$ à trois composantes, défini par

$$S(x)_j = \frac{1}{2}\varphi(x)^* \sigma_j \varphi(x), \qquad j = 1, 2, 3, \tag{1}$$

où

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

sont les *matrices de Pauli*. Dans (1), il faut comprendre que $\varphi(x)$ est un vecteur colonne, alors que $\varphi(x)^* = (\overline{\varphi_1(x)}, \overline{\varphi_2(x)})$ est le vecteur ligne associé, de sorte que $S(x)_j$ est un réel pour tout $j = 1, 2, 3$. On a aussi $\varphi(x)^*\varphi(x) = |\varphi(x)|^2$ (la norme euclidienne de $\mathbb{C}^2$).

Le couplage entre le champ magnétique et le spin se fait alors via le *terme de Zeeman*

$$\sqrt{\alpha}\int_{\mathbb{R}^3} B(x)\cdot S(x)\,dx.$$

Pour un vecteur $v\in\mathbb{R}^3$ quelconque, on introduit la notation $v\cdot\sigma := \sum_{k=1}^3 v_k\sigma_k$ qui définit une matrice 2×2. Le terme de Zeeman peut alors s'écrire sous la forme

$$\frac{\sqrt{\alpha}}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(x)^*\underbrace{\big(B(x)\cdot\sigma\big)}_{\text{matrice }2\times 2}\varphi(x)\,dx$$

et l'énergie totale du système devient

$$\mathcal{E}(\varphi,A)=\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\left|-i\nabla\varphi(x)+\sqrt{\alpha}A(x)\varphi(x)\right|^2\,dx+\frac{\sqrt{\alpha}}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(x)^*\big(B(x)\cdot\sigma\big)\varphi(x)\,dx$$
$$-\kappa\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|\varphi(x)|^2}{|x|}\,dx+\frac{1}{8\pi}\int_{\mathbb{R}^3}|\mathrm{rot}\,A(x)|^2\,dx \quad (3)$$

Le premier terme doit être compris sous la forme

$$\begin{aligned}\left|-i\nabla\varphi+\sqrt{\alpha}A\varphi\right|^2&=\left|-i\nabla\varphi_1+\sqrt{\alpha}A\varphi_1\right|^2+\left|-i\nabla\varphi_2+\sqrt{\alpha}A\varphi_2\right|^2\\&=\sum_{k=1}^3\left|-i\partial_{x_k}\varphi_1+\sqrt{\alpha}A_k\varphi_1\right|^2+\left|-i\partial_{x_k}\varphi_2+\sqrt{\alpha}A_k\varphi_2\right|^2.\end{aligned}$$

Question 3-a. Montrer que $\mathcal{E}_{\rm cm}$ est bien définie et continue sur l'espace

$$\mathcal{X}=\left\{(\varphi,A)\in H^1(\mathbb{R}^3,\mathbb{C}^2)\times L^6(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3)\ :\ \mathrm{rot}\,A\in L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3),\ \mathrm{div}\,A=0\right\}.$$

(seul le fait que φ est à valeurs dans $\mathbb{C}^2$ a changé, par rapport à $\tilde{\mathcal{X}}$). Comme précédemment, on introduit le problème variationnel

$$I(\alpha,\kappa):=\inf_{\substack{(\varphi,A)\in\mathcal{X}\\ \int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|^2=1}}\mathcal{E}(\varphi,A).$$

Question 3-b. Nous étudions ici les propriétés élémentaires des matrices de Pauli.

(i) Montrer que $\sigma_k^2=I_2$ for $k=1,2,3$ (I_2 est la matrice identité 2×2) et que $\sigma_1\sigma_2\sigma_3=i\,I_2$. En déduire que $\sigma_1\sigma_2=i\sigma_3$, $\sigma_2\sigma_3=i\sigma_1$, $\sigma_1\sigma_3=-i\sigma_2$.

(ii) Montrer que pour tout $v\in\mathbb{R}^3$, on a $(\sigma\cdot v)^2=|v|^2\,I_2$, et donc que pour tout $w\in\mathbb{C}^2$ et $v\in\mathbb{R}^3$, on a $|w^*(\sigma\cdot v)w|\leqslant|v|\,|w|^2$.

(iii) En déduire que pour tout $(\varphi,A)\in\mathcal{X}$,

$$\int_{\mathbb{R}^3}\left|-i\nabla\varphi(x)+\sqrt{\alpha}A(x)\varphi(x)\right|^2\,dx+\sqrt{\alpha}\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(x)^*\big(B(x)\cdot\sigma\big)\varphi(x)\,dx$$
$$=\int_{\mathbb{R}^3}\left|\sigma\cdot\big(-i\nabla+\sqrt{\alpha}A(x)\big)\,\varphi(x)\right|^2\,dx\geqslant 0. \quad (4)$$

Question 3-c. Déduire des questions précédentes que pour tout $0<\varepsilon\leqslant 1$,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\varphi,A)&\geqslant\frac{\varepsilon}{2}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla|\varphi|(x)|^2\,dx+\varepsilon\frac{\sqrt{\alpha}}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(x)^*\big(B(x)\cdot\sigma\big)\varphi(x)\,dx\\&\qquad-\kappa\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|\varphi(x)|^2}{|x|}\,dx+\frac{1}{8\pi}\int_{\mathbb{R}^3}|B(x)|^2\,dx.\\&\geqslant\frac{\varepsilon}{2}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla|\varphi|(x)|^2\,dx-\kappa\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|\varphi(x)|^2}{|x|}\,dx-\frac{\pi}{2}\alpha\varepsilon^2\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi(x)|^4\,dx.\end{aligned}$$

Question 3-d. Montrer que $\|\varphi\|_{L^4} \leqslant C \|\varphi\|_{L^2}^{1/4} \|\nabla\varphi\|_{L^2}^{3/4}$. En optimisant par rapport à ε, en déduire que

$$\mathcal{E}(\varphi, A) \geqslant \frac{1}{4}\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla|\varphi|(x)|^2\, dx\right) \min\left(1, \frac{C}{\alpha\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla|\varphi|(x)|^2\, dx\right)^{1/2}}\right) - \kappa \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2}{|x|}\, dx$$

pour tout φ normalisé dans L^2.

Question 3-e. Montrer que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|}\, dx \leqslant C \|u\|_{L^2} \|\nabla u\|_{L^2}.$$

Question 3-f. En déduire que $I(\alpha, \kappa) > -\infty$ dès que $\alpha\kappa$ est assez petit.

Partie 4. Instabilité du modèle avec couplage spinoriel.

Dans la partie précédente nous avons montré que l'atome d'hydrogène en interaction avec le champ était stable lorsque $\alpha\kappa$ est assez petit. Dans cette partie, nous prouvons qu'il est instable lorsque $\alpha\kappa$ est assez grand.

Question 4-a. Dans cette question, nous construisons un couple $(\varphi, A) \in \mathcal{X}$ non nul tel que

$$\sigma \cdot (-i\nabla\varphi(x) + A(x)\varphi(x)) = 0 \text{ presque partout.} \tag{5}$$

(i) Soit $\varphi = (1 + |x|^2)^{-3/2}(I_2 + i\sigma \cdot x)v$ pour un vecteur quelconque $v \in \mathbb{C}^2$. Montrer que $-i(\sigma \cdot \nabla)\varphi(x) = \frac{3}{1+|x|^2}\varphi(x)$ et en déduire que $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$.

(ii) Nous introduisons le potentiel vecteur $A(x)$ dont les composantes sont données par $A(x)_k = -3(1+|x|^2)\varphi(x)^*\sigma_k\varphi(x)$. Vérifier que $\sigma \cdot \big(-i\nabla + A(x)\big)\varphi(x) = 0$ et que $A \in L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$.

(iii) Calculer $B = \operatorname{rot} A$ et vérifier que $B \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

(iv) Montrer que $\operatorname{div} A(x) = 6(w \cdot x)(1 + |x|^2)^{-2}$ où $w_k := v^*\sigma_k v$.

(v) En utilisant l'invariance de jauge, en déduire qu'on peut trouver $(\varphi, A) \in \mathcal{X}$ vérifiant (5). Expliquer aussi pourquoi on peut garantir $\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2 = 1$.

Question 4-b. Soit $(\varphi, A) \in \mathcal{X}$ une solution quelconque non triviale de l'équation (5), telle que $\int |\varphi|^2 = 1$. On introduit alors la famille à un paramètre

$$\varphi_\lambda(x) = \lambda^{3/2}\varphi(\lambda x), \qquad A_\lambda(x) = \lambda\alpha^{-1/2}A(\lambda x).$$

Montrer que $(\varphi_\lambda, A_\lambda) \in \mathcal{X}$ et que $\sigma \cdot (-i\nabla\varphi_\lambda + \sqrt{\alpha}A_\lambda\varphi_\lambda) = 0$, pour tout $\lambda > 0$.

Question 4-c. Calculer $\mathcal{E}(\varphi_\lambda, A_\lambda)$ et en déduire que $I(\alpha, \kappa) = -\infty$ lorsque

$$\alpha\kappa > \frac{\int_{\mathbb{R}^3} |B|^2}{8\pi \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\varphi(x)|^2}{|x|}\, dx}.$$

Partie 5. Existence d'un minimiseur pour $\alpha\kappa$ assez petit.

Dans cette dernière partie, on suppose que $I(\alpha, \kappa) > -\infty$ avec $\alpha, \kappa > 0$, et on prouve l'existence d'un minimiseur au problème de minimisation $I(\alpha, \kappa)$.

Question 5-a. Soit (φ_n, A_n) une suite minimisante pour $I(\alpha, \kappa)$. En utilisant les estimées de la partie 3, montrer que $\sigma \cdot (-i\nabla\varphi_n + A_n\varphi_n)$ est bornée dans L^2, que $B_n = \operatorname{rot} A_n$ est bornée dans L^2 et que A_n est bornée dans L^6.

Question 5-b. En déduire que φ_n est bornée dans H^1.

Question 5-c. À extraction d'une sous-suite près, on suppose maintenant que

- $\varphi_n \rightharpoonup \varphi$ faiblement dans H^1 et fortement dans L^2_{loc},
- $A_n \rightharpoonup A$ faiblement dans L^6,
- $B_n = \operatorname{rot} A_n \rightharpoonup \operatorname{rot} A := B$ faiblement dans L^2.

Montrer que
$$\mathcal{E}(\varphi, A) \leqslant \liminf_{n\to\infty} \mathcal{E}(\varphi_n, A_n).$$

Question 5-d. Montrer que $I(\alpha, \kappa) < 0$ dès que $\alpha, \kappa > 0$. En déduire que $\varphi \neq 0$.

Question 5-e. Montrer que $\mathcal{E}(\varphi/\left\|\varphi\right\|_{L^2}, A) \leqslant \mathcal{E}(\varphi, A)$ et en déduire que $\left\|\varphi\right\|_{L^2} = 1$ et que (φ, A) est un minimiseur pour $I(\alpha, \kappa)$.

Question 5-f. Montrer que $\varphi_n \to \varphi$ fortement dans H^1, que $B_n \to B$ fortement dans L^2 et que $A_n \to A$ fortement dans L^6.

Question 6 (difficile). Montrer que l'atome d'hydrogène stable pour

$$\alpha\kappa < \inf_{\substack{(\varphi,A)\in\mathcal{X} \\ \sigma\cdot(-i\nabla\varphi+\sqrt{\alpha}A\varphi)=0 \\ \int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|^2=1}} \frac{\int_{\mathbb{R}^3} |\operatorname{rot} A(x)|^2\,dx}{8\pi\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\varphi(x)|^2}{|x|}\,dx},$$

puis que l'infimum à droite est atteint.