Examen de M2 ANEDP (2008-09)

Modélisation et simulation des atomes et molécules en physique quantique (Éric Cancès & Mathieu Lewin)

15 Mai 2009

Les notes de cours sont autorisées. Il sera tenu compte de la rédaction.

Nous étudions un modèle relativiste pour les étoiles bosoniques, basé sur une fonctionnelle de type Hartree, elle-même déduite d'un modèle à N corps. Nous montrons l'instabilité des étoiles comportant trop de particules ainsi que l'existence d'un minimiseur lorsque le nombre de particules n'est pas trop élevé.

Partie 1. Énergie cinétique pseudo-relativiste.

On rappelle que l'observable associée à l'énergie cinétique (non relativiste) d'une particule quantique dans $\mathbb{R}^3$ est donnée par $-\Delta/(2m)$ où m est sa masse. Dans cette première partie, on définit une autre observable tenant compte de certains effets relativistes, formellement donnée par

$$T_{m,c} := \sqrt{m^2c^4 - c^2\Delta} - mc^2$$

où m est toujours la masse de la particule et c est la vitesse de la lumière. On va définir $T_{m,c}$ de sorte que

$$\forall \varphi \in H^1(\mathbb{R}^3), \qquad \langle T_{m,c}\varphi, \varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\sqrt{m^2c^4 + c^2|p|^2} - mc^2\right) |\widehat{\varphi}(p)|^2 dp$$

où

$$(\mathcal{F}\varphi)(p) = \widehat{\varphi}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(x) e^{-ip\cdot x} dx$$

est la transformée de Fourier de φ. On rappelle que $\mathcal{F}$ est une isométrie: $\|\widehat{\varphi}\|_{L^2} = \|\varphi\|_{L^2}$. De plus, si $\varphi_t(x) = t^{3/2}\varphi(tx)$, alors $\widehat{\varphi_t}(p) = t^{-3/2}\widehat{\varphi}(p/t)$.

Question 1-a. On suppose que $c \neq 0$ et $m \geqslant 0$. Soit $h_{m,c} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ la fonction définie par

$$h_{m,c}(p) = \sqrt{m^2c^4 + c^2|p|^2}.$$

On note $K_{m,c}$ l'opérateur de multiplication défini sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ par $(K_{m,c}f)(p) = h(p)f(p)$. Sur quel domaine $D(K_{m,c})$ doit-on définir $K_{m,c}$ pour obtenir un opérateur autoadjoint ?

Question 1-b. On peut maintenant considérer l'opérateur auto-adjoint

$$T_{m,c} := \mathcal{F}^{-1} K_{m,c} \mathcal{F} - mc^2$$

sur le domaine $D(T_{m,c}) = \mathcal{F}^{-1}D(K_{m,c})$, où $\mathcal{F}$ est la transformée de Fourier. Montrer que $D(T_{m,c}) = H^1(\mathbb{R}^3)$. Quel est le spectre de $T_{m,c}$?

Question 1-c. Montrer que pour toute fonction $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$, on a

$$\langle T_{m,c}\varphi, \varphi\rangle \leqslant \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\varphi(x)|^2 dx \tag{1}$$

et

$$\lim_{c\to\infty} \langle T_{m,c}\varphi, \varphi\rangle = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\varphi(x)|^2 dx.$$

Interpréter le résultat.

Dans toute la suite, on se place dans un système d'unités pour lequel $c = 1$ et on note pour simplifier

$$T_m := T_{m,1} = \sqrt{m^2 - \Delta} - m.$$

Question 1-d. Montrer que $T_m \geqslant 0$ et que

$$T_0 - m \leqslant T_m \leqslant T_0, \tag{2}$$

au sens des formes quadratiques (on rappelle que $A \leqslant B$ si $\langle Ax, x\rangle \leqslant \langle Bx, x\rangle$ pour tout $x \in D(A) \cap D(B)$).

Partie 2. Dérivation de l'énergie de type Hartree.

On désire étudier un système de N bosons relativistes, interagissant uniquement par le potentiel *gravitationnel*, donc toujours attractif, comme on peut en trouver dans certaines étoiles. Le Hamiltonien à N corps du système est donné par

$$H = \sum_{i=1}^{N} (T_m)_{x_i} - \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant N} \frac{m^2 G}{|x_i - x_j|}$$

où G est une constante gravitationnelle. Grâce à la partie 1 et à l'inégalité (4), on peut définir H sur $D(H) = H^1(\mathbb{R}^{3N})$ mais pour l'instant on se contentera de le définir sur $D(H) = C_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ (l'espace des fonctions de classe C^∞ à support compact). On n'étudiera pas le caractère auto-adjoint de H.

Question 2. Soit $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ une fonction régulière à support compact, telle que $\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(x)^2 dx = 1$, et Ψ la fonction d'onde donnée par

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

Vérifier que Ψ est normalisée pour la norme de $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ et calculer l'énergie $\langle \Psi, H\Psi\rangle$ de la fonction Ψ, en fonction de φ.

Partie 3. Définition et stabilité du modèle de Hartree.

On introduit la fonctionnelle suivante, définie pour l'instant pour $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi) := \langle \varphi, T_m \varphi\rangle - \frac{\kappa}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\varphi(x)^2 \varphi(y)^2}{|x - y|} dx\, dy, \tag{3}$$

où κ est une constante strictement positive. On admettra *l'inégalité de Hardy-Kato*:

$$\forall \varphi \in H^1(\mathbb{R}^3), \qquad \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\varphi(x)^2}{|x|} dx \leqslant \frac{\pi}{2} \langle \varphi, T_0 \varphi\rangle \tag{4}$$

où $T_0 = \sqrt{-\Delta}$ a été correctement défini dans la partie 1.

Question 3-a. Montrer que

$$\forall \varphi \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\varphi(x)^2 \varphi(y)^2}{|x - y|} dx\, dy \leqslant \frac{\pi}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2 \right) \langle \varphi, T_0 \varphi\rangle. \tag{5}$$

En déduire que la fonctionnelle $\mathcal{E}_{m,\kappa}$ est en fait bien définie sur tout $H^1(\mathbb{R}^3)$.

On définit maintenant le problème variationnel suivant:

$$\boxed{I_{m,\kappa}(\lambda) := \inf_{\substack{\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2 = \lambda}} \mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi).} \tag{6}$$

A priori, on peut bien sûr avoir $I_{m,\kappa}(\lambda) = -\infty$.

Question 3-b. Soit $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ et $\varphi_{t,s}(x) = t^{\frac{3}{2}} s^{\frac{1}{2}} \varphi(tx)$. Montrer que

$$\mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi_{t,s}) = ts\, \mathcal{E}_{m/t, s\kappa}(\varphi)$$

et en déduire que pour tous $t, s > 0$

$$I_{m,\kappa}(s\lambda) = ts\, I_{m/t, s\kappa}(\lambda). \tag{7}$$

Question 3-c. Si $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ et v est un vecteur de $\mathbb{R}^3$, on note $\varphi_v(x) := \varphi(x - v)$ la translatée de φ.

(i) Montrer que $\mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi_v) = \mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi)$ pour tout $v \in \mathbb{R}^3$ et tout $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$.

(ii) On suppose que $m > 0$. En utilisant (1), montrer que $\lim_{t \to 0} \left\langle T_{m/t}\varphi, \varphi \right\rangle = 0$ pour tout $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$. En déduire que $I_{m,\kappa}(\lambda) < 0$, puis que $\mathcal{E}_{m,\kappa}$ n'est pas semi-continue inférieurement pour la topologie faible de $H^1(\mathbb{R}^3)$.

Question 3-d. On étudie dans cette question le problème à masse nulle, $m = 0$.

(i) Montrer que $I_{0,\kappa}(\lambda)$ est égal à 0 ou à $-\infty$.

(ii) On considère le nombre réel

$$\sigma := \inf_{\substack{\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2 = 1}} \frac{\langle T_0 \varphi, \varphi \rangle}{\iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\varphi(x)^2 \varphi(y)^2}{|x-y|} dx\, dy} < \infty.$$

L'inégalité (5) démontrée précédemment montre que $\sigma \geqslant \frac{2}{\pi}$. Pour $\kappa > 0$, on pose maintenant

$$\boxed{\lambda(\kappa) = \frac{2}{\kappa}\sigma.}$$

Montrer que

$$I_{0,\kappa}(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leqslant \lambda < \lambda(\kappa) \\ -\infty & \text{si } \lambda > \lambda(\kappa). \end{cases}$$

On pourra utiliser l'égalité $I_{0,\kappa}(\lambda) = \lambda\, I_{0,\kappa\lambda}(1)$ démontrée à la question 3-b.

Question 3-e. En utilisant (2), montrer que quel que soit $m \geqslant 0$, $I_{m,\kappa}(\lambda)$ est fini pour $0 \leqslant \lambda < \lambda(\kappa)$ et est égal à $-\infty$ pour $\lambda > \lambda(\kappa)$.

Question 3-f: Interprétation physique. En utilisant la question 2, en déduire que les étoiles bosoniques comportant trop de particules sont instables. Donner une estimation du nombre maximal de particules que peut comprendre une telle étoile, en fonction de G, m et σ.

Remarque. Pour les étoiles à neutrons, on a $m^2 G \sim 10^{38}$. L'estimée précédente correspond alors à des objets de la taille d'une montagne.

Partie 4. Existence d'un minimiseur quand $\lambda < \lambda(\kappa)$.

Dans cette partie, on démontre l'existence d'un minimiseur pour le problème $I_{m,\kappa}(\lambda)$, dès que $0 < \lambda < \lambda(\kappa)$ et $m > 0$.

Question 4-a. On suppose que le problème $I_{m,\kappa}(\lambda)$ possède un minimiseur $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$. Soit $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ avec $\langle \varphi, \psi \rangle = 0$, et $t \in \mathbb{R}$. Développer $\mathcal{E}_{m,\kappa}\left(\frac{\varphi + t\psi}{\sqrt{1+t^2}}\right)$ et en déduire les conditions du premier et du second ordre.

Question 4-b. Soit $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$. On introduit l'opérateur

$$H_\varphi := T_m - \kappa\varphi^2 * \frac{1}{|x|}.$$

Montrer que H_φ est auto-adjoint sur $H^1(\mathbb{R}^3)$, et que son spectre essentiel vaut $[0, \infty)$. En utilisant l'inégalité (1), montrer que si $m > 0$ et $\varphi \neq 0$, H_φ possède toujours une infinité de valeurs propres sous son spectre essentiel.

Question 4-c. Montrer qu'un minimiseur φ pour $I_{m,\kappa}(\lambda)$ est solution de l'équation aux valeurs propres non linéaires:

$$H_\varphi\, \varphi = \theta\varphi$$

où θ est la première valeur propre de H_φ. Montrer aussi que θ est une valeur propre simple.

Question 4-d. On suppose que $0 < \lambda < \lambda(\kappa)$ et on se donne un $\epsilon > 0$ tel que $\lambda/(1-\epsilon) < \lambda(\kappa)$. Montrer que

$$\mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi) \geqslant \epsilon\langle T_m\varphi, \varphi\rangle + (1-\epsilon) I_{m,\kappa/(1-\epsilon)}(\lambda)$$

puis que $I_{m,\kappa/(1-\epsilon)}(\lambda) > -\infty$.

Question 4-e. On suppose toujours que $0 < \lambda < \lambda(\kappa)$. Soit (φ_n) une suite minimisante pour le problème $I_{m,\kappa}(\lambda)$. Montrer que (φ_n) est bornée dans l'espace de Hilbert

$$H^{1/2}(\mathbb{R}^3) = \left\{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3) \ :\ |p|^{1/2}\widehat{\varphi}(p) \in L^2(\mathbb{R}^3)\right\}$$

pour la norme associée:

$$\|\varphi\|^2_{H^{1/2}(\mathbb{R}^3)} = \int_{\mathbb{R}^3} \sqrt{1+|p|^2}\,|\widehat{\varphi}(p)|^2\, dp.$$

Question 4-f. Soit $H^{1/2}_{\mathrm{rad}}(\mathbb{R}^3)$ l'espace constitué des fonctions radiales appartenant à $H^{1/2}(\mathbb{R}^3)$. On admettra que $H^{1/2}_{\mathrm{rad}}(\mathbb{R}^3)$ s'injecte dans $L^p(\mathbb{R}^3)$ pour $2 \leqslant p \leqslant 3$ avec injection *compacte* pour $2 \leqslant p < 3$. Montrer que le problème de minimisation

$$I^{\mathrm{rad}}_{m,\kappa}(\lambda) := \inf_{\substack{\varphi \in H^{1/2}_{\mathrm{rad}}(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2 = \lambda}} \mathcal{E}_{m,\kappa}(\varphi) \tag{8}$$

admet un minimiseur φ lorsque $0 < \lambda < \lambda(\kappa)$, puis que $\varphi \in H^1_{\mathrm{rad}}(\mathbb{R}^3)$.

Question 4-g (difficile). Montrer que

$$I_{m,\kappa}(\lambda) = I^{\mathrm{rad}}_{m,\kappa}(\lambda)$$

et en déduire l'existence d'un minimiseur pour le problème $I_{m,\kappa}(\lambda)$ lorsque $0 < \lambda < \lambda(\kappa)$.