

Master 2: “Physique” recherche:

Spécialité physique théorique et mathématique, physique des particules et astroparticules

Mécanique quantique avancée

Problème 1. On considère un système quantique de $N = 2$ particules de même charge, dans le champs électrostatique créé par une charge ponctuelle eZ . On suppose que les particules ne vérifient aucune statistique.

L'espace des états quantiques de ce système est $\mathfrak{H} = L^2((\mathbb{R}^3)^2)$. Le hamiltonien (dans un système d'unité convenablement choisi) est donné par

$$H_{2,Z} = \left(-\frac{1}{2}\Delta_{x_1} - \frac{Z}{|x_1|} \right) \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \left(-\frac{1}{2}\Delta_{x_2} - \frac{Z}{|x_2|} \right) + \frac{1}{|x_1 - x_2|} .$$

1) **Théorème de Newton:**

Soit $|\phi(x)|^2$ une distribution de charge sur \mathbb{R}^3 . Soit $V(x)$ le potentiel électrique engendré par cette distribution de charge,

$$V(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x - y|} |\phi(y)|^2 dy .$$

On suppose que $|\phi(x)|$ est à symétrie sphérique. Nous allons montrer que pour tout $x \in \mathbb{R}^3$,

$$(1) \quad |V(x)| \leq \frac{1}{|x|} \int_{\mathbb{R}^3} |\phi(y)|^2 dy .$$

On a de plus (on ne le montrera pas ici), si $|\phi(x)|^2$ est à support inclus dans la boule $B(0, R)$ de centre 0 et de rayon R , alors pour tout x tel que $|x| \geq R$,

$$|V(x)| = \frac{1}{|x|} \int_{\mathbb{R}^3} |\phi(y)|^2 dy .$$

Montrer (1) en utilisant la relation

$$(2) \quad \frac{1}{|\mathbb{S}^2|} \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{|rw - y|} dw = \min(r^{-1}, |y|^{-1}) ,$$

où \mathbb{S}^2 est la sphère unité.

2) Soit $\psi_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\|\psi_1\| = 1$, l'état fondamental pour le hamiltonien d'un atome hydrogénoïde

$$H_1 = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{|x|} .$$

On a alors, pour $E_1(Z) = \inf \sigma(H_1)$,

$$H_1 \psi_1 = E_1(Z) \psi_1 .$$

et ψ_1 est à symétrie sphérique (admis ici).

Soit $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ quelconque, tel que $\|\varphi\| = 1$, et $\varphi \perp \psi_1$. Soit $\varphi_R(x) = R^{-\frac{3}{2}} \varphi(x/|R|)$.

On considère

$$\psi = \psi_1 \otimes \varphi_R .$$

2a) Montrer l'égalité

$$\langle \psi, \left(-\frac{1}{2}\Delta_{x_1} - \frac{Z}{|x_1|} \right) \otimes \mathbf{1} \psi \rangle = E_1(Z) .$$

2b) En utilisant un argument de changement d'échelle, montrer qu'il existe $c_\varphi^{(1)}$ tel que pour tout $R > 0$,

$$\langle \psi, \mathbf{1} \otimes \left(-\frac{1}{2}\Delta_{x_2} - \frac{Z}{|x_2|} \right) \psi \rangle \leq c_\varphi^{(1)} \frac{1}{R^2} - \frac{Z}{R} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx$$

2c) En utilisant le théorème de Newton ci-dessus, montrer

$$\langle \psi, \frac{1}{|x_1 - x_2|} \psi \rangle \leq \frac{1}{R} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx$$

2d) Dédire de ce qui précède

$$\langle \psi, H_{2,Z} \psi \rangle < E_1(Z) .$$

Conclure, à l'aide du théorème HVZ, que $H_{2,Z}$ admet un état fondamental.

Problème 2. On considère un système de N électrons, dans le champs électrostatique créé par K noyaux statiques ponctuels, de charge respective eZ_1, eZ_2, \dots, eZ_K , situés en R_1, R_2, \dots, R_K (distincts).

Dans un système d'unités convenablement choisi, le hamiltonien de ce système est donné par:

$$H_{N,K} = \sum_{i=1}^N (-\Delta_{x_i}) - \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^K \frac{Z_j}{|x_j - R_j|} \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|} \quad \text{sur} \quad \bigwedge_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3).$$

On note

$$H'_{N,K} := H_{N,K} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (-\Delta_{x_i}),$$

et pour $\psi \in \mathcal{D}(H_{N,K})$, $\mathcal{E}(\psi) := \langle \psi, H_{N,K} \psi \rangle$ et $T(\psi) = \sum_{i=1}^N \langle -\Delta_{x_i} \psi, \psi \rangle$.

1) Pour $N = 2, K = 1$ et $R_1 = 0$, montrer que $H_{N,K}$ est auto-adjoint sur $\bigwedge_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3) \cap H^2(\mathbb{R}^{3N})$.

2) On appelle rayon moyen du système l'observable

$$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i|.$$

Montrer que

$$\langle \psi, R\psi \rangle = \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^3} |x| \rho_\psi(x) dx,$$

où $\rho_\psi(x)$ est la densité électronique dans l'état ψ .

3) En utilisant le résultat de stabilité de deuxième type pour le hamiltonien $H'_{N,K}$, montrer qu'il existe une constante $c > 0$ telle que pour tout $\psi \in \mathcal{D}(H_{N,K})$ vérifiant $\mathcal{E}(\psi) < 0$, on a

$$(3) \quad T(\psi) \leq c \|\psi\| \left(\sum_{j=1}^K Z_j^{\frac{7}{3}} + N \right).$$

4) Pour $r > 0$, montrer

$$\int_{|x| < r} \frac{\rho_\psi(x)}{|x|} dx \leq 8\pi r^{\frac{1}{3}} \|\rho_\psi\|_{\frac{5}{3}} \quad \text{et} \quad \int_{|x| \geq r} \frac{\rho_\psi(x)}{|x|} dx \leq \frac{1}{r} \int \rho_\psi(x) dx.$$

En choisissant $r = \left(\frac{\int \rho_\psi}{\|\rho_\psi\|_{\frac{5}{3}}} \right)^{\frac{5}{6}}$, en déduire

$$N^4 = \left(\int \rho_\psi(x) dx \right)^4 \leq C \|\rho_\psi\|_{\frac{5}{3}}^4 \left(\int \rho_\psi \right)^{\frac{1}{3}} \left(\int |x| \rho_\psi(x) dx \right)^2$$

En utilisant (3) et la conséquence de l'inégalité de Lieb-Thirring, en déduire qu'il existe $c_1 < \infty$ et $c_2 > 0$ tels que pour tout ψ dans le domaine de $H_{N,K}$, d'énergie négative, et tel que $\|\psi\| = 1$, on a

$$c_1 \left(N + \sum_{j=1}^K Z_j \right) \geq T(\psi) \geq c_2 N^{\frac{11}{3}} \langle \psi, R\psi \rangle^{-2} N^{-2}.$$

5) Pour un système globalement neutre, en déduire que le volume moyen $\langle \psi, R\psi \rangle^3$ dans l'état ψ est au moins proportionnel au nombre de particules N .