Travaux Pratiques de Physique Théorique

Stabilité de la matière

Christian Ferrari

Sous la direction du
Professeur Philippe A. Martin

Institut de Physique Théorique
Département de Physique
EPFL

Semestre d'été 1998

Avant-propos

Le problème de la stabilité de la matière est un problème fondamental de mécanique quantique.

Le problème consiste à déterminer si l'inégalité fondamentale

$$H(n) \geq -Bn \qquad B > 0$$

est satisfaite. En mots on cherche une borne linéaire dans le nombre de particules (n) pour l'énergie, ceci donne donc une densité d'énergie par particule finie et le système ne collapse pas.

Mais la stabilité n'est pas un problème restreint à la mécanique quantique, il est d'une importance capitale aussi en mécanique statistique, en particulier en ce qui concerne l'existence de la limite thermodynamique.

Un fois le problème posé, le travail pour établir la stabilité devient un joli travail de physique mathématique; en effet pour établir l'inégalité fondamentale, il faut trouver l'infimum du spectre de l'hamiltonien étudié. Dans ce travail, le but principal est donc trouver cet infimum et pas tout le spectre; ainsi, du point de vu mathématique, on ne se concentre pas sur la théorie spectrale proprement dite, mais en utilisant des moyens de l'analyse fonctionnelle (espaces L^p, convergence faible), on trouve des minorations pour l'infimum du spectre de l'hamiltonien.

Ce travail ne prétend pas être original, le but de son auteur est celui d'être le plus pédagogique possible, on trouve donc des rappels évidents pour le physicien théoricien, mais pas forcément pour un mathématicien. Il n'est non plus complet (le chapitre trois ne traite que le cas d'un atome hydrogénoïde, et le chapitre quatre ne donne qu'une idée de ce qui se fait à ce jour dans la recherche). Toutefois, la plupart des affirmations sont démontrées "presque dans le détail"; pour celles qui ne le sont pas, on donne la référence (ce qui explique la longue bibliographie!). J'ai cherché de ne pas mépriser la rigueur mathématique, mais vu mon expérience dans le domaine de l'analyse fonctionnelle, il se peut que ce ne soit pas toujours comme ça.

Je tiens ici à remercier le Professeur Philippe Martin pour sa disponibilité, ses conseils et, en particulier, pour m'avoir permis d'aborder cet intéressant sujet dans le cadre des Travaux Pratiques de Physique Théorique. Je remercie aussi mes amis mathématiciens Marcello Lucia et Yves Bolle pour leurs élucidations en ce qui concerne l'analyse fonctionnelle, et bien sûr mon frère Patrik pour son aide . . . .

Table des matières

Chapitre 1

Introduction

Le but de ce travail est l'étude de la *stabilité de la matière*, ceci principalement dans deux cas: premièrement on étudie la stabilité des systèmes coulombiens simples, ensuite on regarde le problème de la stabilité des systèmes coulombiens avec un champ magnétique classique.
Pour terminer on donne un bref aperçu du problème de la stabilité de l'électrodynamique quantique (QED) avec la matière non relativiste.

1.1 Le modèle

1.1.1 Constituants de la matière

La matière ordinaire[1] est constituée d'*électrons* (masse m, charge $-e$ et spin $\frac{1}{2}$) et de *noyaux*, ce derniers composés de *protons* (masse $M_p = M$, charge e et spin $\frac{1}{2}$) et de *neutrons* (masse $M_n \approx M$, charge 0 et spin $\frac{1}{2}$).
Un noyau avec des électrons forme, sous certaines conditions, des atomes, le nombre atomique z est le nombre de protons dans le noyau et il caractérise un type d'atome.
Dans la nature on trouve les atomes pour $z = 1, \ldots, 92$ sauf pour $z = 43, 61, 85$, ces derniers avec ceux pour les quels $z = 93, \ldots, 109$ sont produits artificiellement. Enfin remarquons que pas tous ces atomes sont stables, c'est-à-dire qu'il se désintègrent (transitions α et β).

1.1.2 Les interactions en jeu

Dans des conditions usuelles, les électrons et les noyaux sont soumis au lois de la *mécanique quantique* et à la *force de Coulomb*; où pour conditions

[1] Ce terme sera précisé dans la suite

usuelles on entend que l'énergie est suffisamment basse pour qu'on puisse négliger les effets relativistes et les réactions nucléaires, et que le système est étudié à une échelle où les forces gravifiques ne jouent pas de rôle.
Dans ces conditions la matière peut être décrite comme au paragraphe précédent (ce qui définit le terme matière ordinaire).
Dans le cas où on introduit un champ magnétique classique on aura en plus un couplage entre le spin des électrons et le champ B.

1.2 Approche classique

1.2.1 Énergie d'interaction

Considérons un système formé de N électrons et de k noyaux de charge différente.
Les électrons sont caractérisés par les positions

$$X = (x_1, \dots, x_N) \qquad x_j \in \mathbb{R}^3, 1 \le j \le N$$

les noyaux par les positions

$$R = (R_1, \dots, R_k) \qquad R_j \in \mathbb{R}^3, 1 \le j \le k$$

et les charges (en multiple de e)

$$Z = (z_1, \dots, z_k) \qquad z_j \in \mathbb{N}, 1 \le j \le k$$

L'*énergie potentielle totale* est donnée par[2]

$$W(X) = -A(X) + B(X) + U \tag{1.1}$$

avec:

$$A(X) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} \frac{z_j e^2}{|x_i - R_j|} \tag{1.2}$$

$$B(X) = \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{e^2}{|x_i - x_j|} \tag{1.3}$$

$$U = \sum_{1 \le i < j \le k} \frac{z_i z_j e^2}{|R_i - R_j|} \tag{1.4}$$

[2]La dépendance en R et Z est implicite

1.2.2 Formalisme hamiltonien

On va considérer que les noyaux sont fixés, ainsi les degrés de liberté sont les $3N$ liés aux électrons, ceci nous permet d'introduire la *fonction hamiltonienne* des N électrons (et des k noyaux)

$$\begin{array}{rcl} H : \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (X, P) & \longmapsto & H(X, P) \end{array}$$

où:

$$H(X, P) = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + W(X) \tag{1.5}$$

le vecteur P étant le moment conjugué de X et $W(X)$ est donné par (1.1). Les équations du mouvement sont les *équations canoniques de Hamilton* bien connues

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{dx_i}{dt} & = & \dfrac{\partial H(X, P)}{\partial p_i} \\ \dfrac{dp_i}{dt} & = & -\dfrac{\partial H(X, P)}{\partial x_i} \qquad 1 \leq i \leq N \end{array}$$

Théorème 1.1. *Pour l'hamiltonien (1.5) on a*

$$\frac{dH(X, P)}{dt} = 0 \Longrightarrow H(X, P) = E = cte$$

E est l'énergie totale du système et peut prendre toutes les valeurs dans l'ensemble $\mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$.

Preuve.

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{d}{dt} H(X, P) & = & \dfrac{d}{dt}\left(\displaystyle\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + W(X)\right) \\ & = & \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{m}\frac{dp_i}{dt} + \sum_{i=1}^{N} \frac{dW(X)}{dx_i}\frac{dx_i}{dt} \\ & = & -\displaystyle\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{m}\frac{\partial H(X, P)}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial H(X, P)}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt} \\ & = & 0 \end{array}$$

□

Le flot associé aux équations de Hamilton préserve la mesure de Lebesgue

$$d\mu = dx_1 \dots dx_N dp_1 \dots dp_N$$

c'est le *théorème de Liouville* [1].

1.2.3 La stabilité de la matière

Classiquement la stabilité de la matière[3] pose des problèmes car le potentiel coulombien est singulier à l'origine, on verra que, en considérant la nature quantique du système, ce problème sera résolu.

1.3 Description d'un système quantique

Du point de vue mathématique la mécanique quantique se base sur la notion d'*espace de Hilbert* (séparable): un état est représenté par un vecteur dans cet espace et sur celui-ci agissent des opérateurs linéaires auto-adjoints représentant des observables.

1.3.1 Cas d'une particule quantique

L'espace de Hilbert et l'interprétation probabiliste

L'espace de Hilbert qui permet de décrire une particule quantique non relativiste, de spin $\frac{1}{2}$, est

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, dx; \mathbb{C}^2) \simeq L^2(\mathbb{R}^3, dx) \otimes \mathbb{C}^2$$

dx étant la mesure de Lebesgue dans $\mathbb{R}^3$, explicitement on a

$$\mathcal{H} = \left\{ \{\psi_1(x), \psi_2(x)\} : \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_i(x)|^2 \, dx < \infty \, , i = 1, 2 \right\}$$

L'espace $\mathcal{H}$ est muni du produit scalaire

$$(\psi, \phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_1(x)^* \phi_1(x) + \psi_2(x)^* \phi_2(x) \, dx$$

ceci induit la norme

$$\|\psi\|_2 = (\psi, \psi)^{1/2}$$

qui permet de définir la notion de distance.

L'état d'une particule est donc décrite par un *spineur* à deux composantes $\psi(x) = \{\psi_1(x), \psi_2(x)\}$.

Supposons $\psi(x)$ normalisée, alors la grandeur

$$\rho_\psi(x) = |\psi(x)|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 \tag{1.6}$$

[3]Ce concept sera précisé dans ce qui suit

s'interprète comme la densité de probabilité de trouver la particule au point x de l'espace de configuration.
À partir de la densité de probabilité on peut définir des valeurs moyennes (espérance mathématique).
Soit W une fonction sur $\mathbb{R}^3$ mesurable (variable aléatoire), alors on définit l'*espérance mathématique* de W par

$$W_\psi = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\psi(x) W(x)\, dx \tag{1.7}$$

Un cas particulièrement intéressant est celui du potentiel, c'est-à-dire la fonction définie par (1.1).

Transformée de Fourier et énergie cinétique

Soit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ l'ensemble des fonctions C^∞ à décroissance rapide [21].

Définition 1.1. *Supposons $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. La transformée de Fourier de f est la fonction $\hat{f}$ donné par*

$$\hat{f}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\frac{(p,x)}{\hbar}} f(x)\, dx$$

Remarques

- La transformée de Fourier s'étend à $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ en utilisant l'identité de Plancherel et le fait que $\mathcal{S}$ est dense dans L^2 [22].
- La transformée de Fourier d'un spineur est le spineur des transformées.

Ces considérations étant faites, on peut interpréter

$$\rho_{\hat{\psi}}(p) = |\hat{\psi}(p)|^2 \tag{1.8}$$

comme la densité de probabilité de trouver la particule avec une impulsion p.
L'espérance mathématique de l'énergie cinétique (premier terme de (1.5)) est donnée par

$$T_\psi = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\hat{\psi}(p)|^2 p^2\, dp = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2\, dx \tag{1.9}$$

la dernière égalité résulte de l'identité $p\hat{\psi} = -i\hbar\nabla\hat{\psi}$ et de l'identité de Plancherel.

Approche abstrait

On aurait pu introduire sur $\mathcal{H}$, via le principe de correspondance, les opérateurs suivants (en représentation de configuration):

$$\begin{array}{rcll} x & \longrightarrow & Q & \text{(op. multiplicatif)} \\ p & \longrightarrow & P = -i\hbar\nabla & \end{array}$$

De telle sorte que (1.1) devient un opérateur multiplicatif et l'énergie cinétique un opérateur différentiel elliptique de deuxième ordre.
Il s'en suit donc que la fonction hamiltonienne devient l'opérateur

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + W(Q) \tag{1.10}$$

appelé l'hamiltonien de Schrödinger.
Avec la formulation en terme d'opérateurs les valeurs moyennes sont données par

$$\begin{aligned} T_\psi &= (\psi, T\psi) = \frac{1}{2m}(\psi, P^2\psi) \\ W_\psi &= (\psi, W\psi) \\ E_\psi &= (\psi, H\psi) \end{aligned}$$

Remarquons que H est auto-adjoint dans [22]

$$\mathcal{D}(H) = \left\{\psi : \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx), \Delta\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx) \text{ au sens des distributions}\right\}$$

1.3.2 Extension à N particules

L'espace de Hilbert $\mathcal{H}^N$ qui permet de décrire N particules est construit, à partir de l'espace $\mathcal{H}$ monoparticulaire, via le produit tensoriel

$$\mathcal{H}^N = \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H} = \mathcal{H}^{\otimes N}$$

Or, on connaît $\mathcal{H}$, donc

$$\mathcal{H}^N = \bigotimes_{i=1}^{N} L^2(\mathbb{R}^3, dx_i; \mathbb{C}^2) \simeq L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x; \mathbb{C}^{2^N})$$

L'état des N particules est d'écrit par un spineur $\Psi(X)$ à 2^N composantes, dont chaque une appartient à $L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x)$.
Ici, si on impose la condition de normalisation sur $\Psi(X)$, on interprète

$|\Psi(X)|^2$ comme la probabilité jointe de trouver la particule 1 en x_1, la 2 en x_2 et ainsi de suite.
Dans ce cas on a les valeurs moyennes suivantes:

$$W_\Psi = \int_{\mathbb{R}^{3N}} W(X)|\Psi(X)|^2 \, d^N x \tag{1.11}$$

$$T_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |(\nabla_{x_i}\Psi)(X)|^2 \, d^N x \tag{1.12}$$

Donc l'énergie moyenne dans l'état $\Psi(X)$ est

$$E_\Psi = T_\Psi + W_\Psi \tag{1.13}$$

1.4 Stabilité de première et deuxième espèce

Le problème de la stabilité concerne l'état fondamental, c'est-à-dire la recherche d'une borne inférieure à l'énergie E de cet état.

1.4.1 Stabilité de première espèce

L'énergie de l'état fondamental est définie ainsi

$$E = E(N, k, R, Z) = \inf_{\Psi} E_\Psi \tag{1.14}$$

L'infimum étant pris sur les Ψ normalisés et qui satisfont au *principe d'exclusion* de Pauli.

Définition 1.2. *Le système est dit stable s'il existe une constante C tel que*

$$|E(N, k, R, Z)| \leq C < \infty$$

pour tout N, k, R et Z.

1.4.2 Stabilité de deuxième espèce

On défini l'état fondamental absolu comme l'état d'énergie la plus petite possible en considérant l'arrangement le plus "favorable" des noyaux, cette énergie correspond à

$$E(N, k, Z) = \inf_{R} E(N, k, R, Z) \tag{1.15}$$

Définition 1.3. *Le système est dit absolument stable, ou H-stable, si il existe une fonction A non négative*

$$\begin{array}{rcl} A:\mathbb{N} & \longrightarrow & \mathbb{R}_+ \\ z & \longmapsto & A(z) \end{array}$$

telle que pour tout N et k

$$E(N,k,Z) \geq -A(z)(N+k) \tag{1.16}$$

avec $z \geq z_j$, $1 \leq j \leq k$.

Il se peut que (1.14) n'existe pas, mais s'il existe un Ψ qui minimise E_Ψ (pas forcement unique) il est l'état fondamental et il satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire

$$H\Psi = E\Psi$$

Chapitre 2

Stabilité des systèmes coulombiens

Dans ce chapitre on s'occupe de la *stabilité des systèmes coulombiens*, en particulier on va considérer le problème des atomes, pour les quels on montre la stabilité de première espèce.
On commence par les atomes hydrogénoïdes (un seul électron); puis on étudie les atomes complexes (plusieurs électrons), tout en restant dans le cas d'atomes neutres.
On termine le chapitre avec le cas général de la matière composée de plusieurs noyaux et plusieurs électrons, dans ce cas on prouve la stabilité de deuxième espèce.

2.1 L'atome d'hydrogène

2.1.1 Position du problème

Le problème considéré ici consiste à prendre $N = 1$, $k = 1$ ($z > 0$) et fixer $R = 0 \in \mathbb{R}^3$: c'est *l'atome d'hydrogène*[1]. Dans ce cas c'est la stabilité de première espèce qu'il faut étudier, on cherche donc une borne inférieure à l'énergie.

Remarque On considère d'ici en avant des unités telles que[2]

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 1 \qquad\qquad e = 1$$

[1]Pour être précis il faudrait parler d'atome hydrogénoïde

[2]On peut se ramener à cette situation par un changement d'échelle approprié

Il faudra donc minimiser

$$E_\psi = T_\psi + W_\psi = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 \, dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{z}{|x|} |\psi(x)|^2 \, dx \tag{2.1}$$

sous la condition

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \tag{2.2}$$

2.1.2 Inégalité de Sobolev

Lemme 2.1 (Inégalité de Sobolev). *Soit* $f \in C_0^1(\mathbb{R}^3)$. *Alors*

$$\|f\|_6 \leq K \|\nabla f\|_2 \tag{2.3}$$

Preuve. Utilisons la notation suivante $f_i \equiv \frac{\partial f(x)}{\partial x_i}, 1 \leq i \leq 3$.
On part de l'inégalité suivante[3]

$$\int_{\mathbb{R}} |f^3 f_i| \, dx_i \geq \frac{1}{4} |f(x)|^4$$

où l'intégral est prise sur la ligne x_j fixé pour $j \neq i$. Alors

$$|f(x)|^{12} \leq K \prod_{i=1}^{3} \left(\int_{\mathbb{R}} |f^3 f_i| \, dx_i \right)$$

On prend la racine carré et on intègre sur dx_1 puis dx_2 et dx_3, chaque fois en utilisant Cauchy-Schwarz[4], on a

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} |f(x)|^6 \, dx &\leq K \prod_{i=1}^{3} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f^3 f_i| \, dx \right)^{1/2} \\ &\leq K \prod_{i=1}^{3} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f_i|^2 \, dx \right)^{1/4} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f|^6 \, dx \right)^{3/4} \end{aligned}$$

[3] Elle s'établit à partir du théorème fondamental du calcul intégral

[4] La première intégration, avec $g_i = f^3 f_i, 1 \leq i \leq 3$, donne

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^6 \, dx_1 \leq K \left(\int_{\mathbb{R}} |g_1| dx_1 \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} dx_1 \int_{\mathbb{R}} dx_2 \, |g_2| \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} dx_1 \int_{\mathbb{R}} dx_3 \, |g_3| \right)^{1/2}$$

la deuxième inégalité suit de l'inégalité de Cauchy-Schwarz. D'où

$$\underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} |f(x)|^6 \, dx}_{\|f\|_6^6} \leq K \prod_{i=1}^{3} \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |f_i|^2 \, dx \right)}_{\|f_i\|_2^2}$$

Or, on peut majorer le produit dans l'expression précédente par $\left(\sum_{i=1}^{3} \|f_i\|_2^2\right)^3$ car on ajoute des termes positifs, ceci donne

$$\|f\|_6^6 \leq K \left(\sum_{i=1}^{3} \|f_i\|_2^2 \right)^3 = K \|\nabla f\|_2^6$$

□

2.1.3 Recherche du minimum

Premier calcul

À l'aide de l'inégalité de Sobolev on va reformuler le problème.
Pour commencer remarquons que

$$T_\psi = \|\nabla \psi\|_2^2 \geq S \|\psi\|_6^2 = S \|\rho_\psi\|_3 \tag{2.4}$$

la constante S vaut $3\left(\frac{\pi}{2}\right)^{4/3}$ [12], ceci borne inférieurement l'énergie cinétique en fonction de la densité de probabilité et "élimine" le gradient de ψ. On peut donc remplacer le problème (2.1)-(2.2) en terme de ψ par un nouveau problème, en terme de ρ, que voici[5]

$$E \geq \inf_{\rho} \left\{ S \|\rho\|_3 - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{z}{|x|} \rho(x) \, dx \right\} \tag{2.5}$$

sous la condition

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x) \, dx = 1 \tag{2.6}$$

Proposition 2.1. *La solution du problème (2.5)-(2.6) est*

$$E \geq -\frac{1}{3} z^2$$

[5] On écrit ρ au lieu de ρ_ψ

Preuve. On va formuler (2.5)-(2.6) sous la forme d'un problème variationnel.
Définissons la fonctionnelle

$$F[\rho] = S\|\rho\|_3 - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{z}{|x|}\rho(x)\,dx$$

et utilisons les multiplicateurs de Lagrange, c'est-à-dire posons

$$\mathcal{L}[\rho] = F[\rho] + \alpha\left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\,dx - 1\right)$$

Calculons maintenant la première variation de $\mathcal{L}[\rho]$

$$\delta^{(1)}\mathcal{L}[\rho;h] = \frac{d}{d\lambda}\mathcal{L}(\rho+\lambda h)\bigg|_{\lambda=0}$$

On trouve

$$\delta^{(1)}\mathcal{L}[\rho;h] = \int_{\mathbb{R}^3}\left(S\frac{\rho^2(x)}{\|\rho\|_3^2} - \frac{z}{|x|} + \alpha\right)h(x)\,dx$$

La condition d'extremalité $\delta^{(1)}\mathcal{L}[\rho;h] = 0\,\forall h$ donne

$$\rho(x) = \|\rho\|_3\left(\frac{z}{S}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{|x|} - \frac{1}{R}\right)^{1/2}$$

si $|x| \leq R$ et $\rho(x) = 0$ si $|x| > R$ (car on doit avoir $\rho(x) \geq 0$), ayant posé $R = \frac{z}{\alpha}$. La valeur de R se détermine par l'égalité

$$\|\rho\|_3 = \left(\int_{x:|x|\leq R} \|\rho\|_3^3\left(\frac{z}{S}\right)^{3/2}\left(\frac{1}{|x|} - \frac{1}{R}\right)^{3/2}\right)^{1/3}$$

(car $\|\rho\|_3$ se simplifie), on trouve

$$R = \frac{S}{z}\left(\frac{4}{\pi^2}\right)^{2/3}$$

Utilisant la condition de normalisation on détermine la valeur de $\|\rho\|_3$, on trouve

$$\|\rho\|_3 = \left(\frac{S}{z}\right)^{1/2}\left(\frac{4}{\pi^2}\right)R^{-5/2}$$

On remplaçant dans (2.5) l'expression de $\rho(x)$, maintenant connue, on trouve

$$E \geq -\frac{1}{S}\left(\frac{\pi^2}{4}\right)^{2/3}z^2$$

d'où si on remplace S par sa valeur on trouve le résultat cherché. $\square$

Deuxième calcul

Un version affaiblie de l'inégalité (2.4) est obtenue graçe à l'inégalité de Hölder comme suit

$$T_\psi \geq S\|\rho\|_3 \underbrace{\|\rho^{2/3}\|_{3/2}}_{=1} \geq S\|\rho^{5/3}\|_1 \tag{2.7}$$

Le grand avantage de cette borne est qu'elle dépend linéairement de l'intégral. Notons que la constante S n'est pas la meilleure, mais elle doit être remplacée par $K_n = 9.578$ trouvé numériquement [12], dans ce qui suit on utilisera $K^c = \frac{3}{5}(6\pi^2)^{2/3} < K_n$ [12].
L'équation (2.5) du problème (2.5)-(2.6) est donc remplacé par

$$E \geq \inf_\rho \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} K^c \rho^{5/3}(x) - \frac{z}{|x|}\rho(x)\, dx \right\} \tag{2.8}$$

Proposition 2.2. *La solution du problème (2.8)-(2.6) est*

$$E \geq -\frac{1}{4} 3^{1/3} z^2$$

Preuve. Soit

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} \left(K^c \rho^{5/3}(x) - \frac{z}{|x|}\rho(x) \right) dx$$

et

$$\mathcal{L}[\rho] = F[\rho] + \alpha \left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\, dx - 1 \right)$$

On trouve

$$\delta^{(1)}\mathcal{L}[\rho; h] = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{5}{3} K^c \rho^{2/3}(x) - \frac{z}{|x|} + \alpha \right) h(x)\, dx$$

D'où

$$\rho(x) = \left(\frac{3}{5} \frac{z}{K^c} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{|x|} - \frac{1}{R} \right)^{3/2}$$

si $|x| < R$ et $\rho(x) = 0$ si $|x| \geq R$, ceci par la positivité, i.e. $\rho(x) \geq 0$; on a posé $R = \frac{z}{\alpha}$. La condition de normalisation de ρ détermine R

$$R = \frac{5}{3} \frac{K^c}{z} \left(\frac{4}{\pi^2} \right)^{2/3}$$

En remplaçant ρ dans (2.8) on trouve

$$E \geq -\frac{9}{5}\frac{z^2}{K^c}\left(\frac{4}{\pi^2}\right)^{2/3}$$

En remplaçant K^c on trouve le résultat cherché. $\square$

2.1.4 Conclusion

Dans les paragraphes précédentes on a trouvé deux bornes inférieures finies à l'énergie de l'atome d'hydrogène (stabilité de première espèce), elles sont de la forme $E \geq -Bz^2$.
Or, pour l'atome hydrogénoïde on connaît l'expression exacte du spectre de H, en particulier[6] $E_0 = -\frac{1}{4}z^2$. Donc, à une constante numérique près, on a le bon comportement.

2.2 Atomes à plusieurs électrons

Dans cette section on va considérer le cas où on a un noyau ($k = 1$), de charge z fixé en $R = 0 \in \mathbb{R}^3$, et $N = z$ électrons.

2.2.1 Le postulat de symétrisation

Lorsque on considère plusieurs électrons il faut introduire un nouveau postulat: *les fonctions d'onde admissibles pour la description des électrons doit être antisymétrique sous l'action du groupe des permutations $\mathcal{S}_N$*. Ceci est une propriété générale des fermions[7].

Donc les fonctions d'onde que l'on doit considérer pour les problèmes de minimisation doivent appartenir à

$$\mathcal{AH}^N = \bigwedge_{i=1}^{N} L^2(\mathbb{R}^3, dx_i; \mathbb{C}^2)$$

$\mathcal{A}$ étant l'antisymétriseur définit dans la suite.

[6] Dans le unités utilisées ici $1[Ry] = \frac{1}{4}$

[7] Pour les bosons la fonction d'onde doit être symétrique

2.2.2 Symétriseurs

Soit $\mathcal{S}_N$ le groupe des permutation de N particules, une représentation sur $\mathcal{H}^N$ est donnée par l'application

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{S}_N & \longrightarrow & \mathcal{L}\left(\mathcal{H}^N, \mathcal{H}^N\right) \\ \pi & \longmapsto & U_\pi \end{array}$$

dont l'action est définie par $U_\pi \Psi(X) = \Psi(\pi X)$.

On définit l'antisymétriseur

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_N} \epsilon(\pi) U_\pi$$

et le symétriseur

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_N} U_\pi$$

avec $\epsilon(\pi)$ la signature de la permutation π[8], ces deux opérateurs sont des projecteurs orthogonaux.
Un état Ψ dans $\mathcal{H}^N$ peut s'écrire comme la somme de deux états orthogonaux: $\Psi = \mathcal{A}\Psi + \mathcal{S}\Psi$, l'énergie de cet état est donc la somme $E_\Psi = E_{\mathcal{A}\Psi} + E_{\mathcal{S}\Psi}$[9].

2.2.3 Le principe de symétrisation et la stabilité

Dans ce paragraphe on va caractériser l'effet du principe d'exclusion sur la recherche d'une borne inférieure pour l'énergie. On a la proposition suivante.

Proposition 2.3. *L'état qui minimise (1.14) est symétrique, et*

$$E = E_{\mathcal{S}\Psi}$$

Preuve. Montrons que $E = E_{\mathcal{S}\Psi}$ ceci nous assure donc que l'état est bien symétrique.
Il est clair que $E_{\mathcal{S}\Psi} \geq E$ car E est l'infimum soit sur les états symétriques, soit sur les états antisymétriques.
Montrons que $E \geq E_{\mathcal{S}\Psi}$, pour cela considérons au lieu de Ψ son module $|\Psi|$,

[8] $\epsilon(\pi) = +1$ si la permutation est paire et $\epsilon(\pi) = -1$ si elle est impaire

[9] Ici on prend Ψ comme une fonction qui se décompose en une somme d'états admissibles (Attention: $\mathcal{S}$ et $\mathcal{A}$ ne forment pas un système complet de projecteurs orthogonaux sur $\mathcal{H}^N$)

ceci est possible car $E_\Psi = E_{|\Psi|}$, dès que Ψ est réelle[10]. Établissons d'abord une inégalité qui sera utile pour la démonstration.

$$\begin{aligned} \|\mathcal{S}|\Psi|\|_2^2 &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \sum_{\pi\in\mathcal{S}_N} \underbrace{\sum_{\sigma\in\mathcal{S}_N} (|\Psi|(\sigma\cdot), |\Psi|(\pi\cdot))}_{\geq(|\Psi|,|\Psi|)} \\ &\geq \frac{1}{N!}\|\Psi\|_2^2 = \frac{1}{N!} \end{aligned}$$

On note E_S l'énergie de l'état $\mathcal{S}|\Psi| = \phi_S$ et E_A l'énergie de l'état $\mathcal{A}|\Psi| = \phi_A$

$$\begin{aligned} E = \inf_\Psi E_\Psi &= \inf_\Psi E_{|\Psi|} = \inf_\Psi (E_S + E_A) \\ &= \inf_\Psi \left((E_S + E_A) \underbrace{(\|\phi_S + \phi_A\|_2^2)}_{=\|\phi_S\|_2^2 + \|\phi_A\|_2^2} \right) \\ &\geq \inf_\Psi \left(E_S\|\phi_S\|_2^2 + E\|\phi_A\|_2^2\right) \\ &= \inf_\Psi \left((E_S - E)\|\phi_S\|_2^2\right) + E \\ &\geq E + \frac{1}{N!}(E_S - E) \end{aligned}$$

d'où $E \geq E_S = E_{\mathcal{S}\Psi}$. □

Ce résultat permet donc d'affirmer que

$$E_{\mathcal{A}\Psi} > E_{\mathcal{S}\Psi} = \inf_\Psi E_\Psi$$

et on voit que l'introduction du principe de symétrisation a pour effet de augmenter l'énergie de l'état fondamental des N fermions (ici N électrons). Le miracle est que, avec ce postulat, l'énergie est augmentée suffisamment pour que la stabilité de deuxième espèce puisse être réalisée.

Remarque Le principe de symétrisation pour des fermions correspond au *principe d'exclusion de Pauli* qui affirme: *deux fermions ne peuvent se trouver dans le même état quantique individuel.*

[10] Comme H est réel on peut choisir Ψ réelle

2.2.4 Loi en 5/3 pour l'énergie cinétique des fermions

Pour chercher de borner l'énergie cinétique des N électrons on définit la *densité à une particule* $\rho_\Psi(x)$ qui représente la densité d'électrons au point $x \in \mathbb{R}^3$

$$\begin{aligned} \rho_\Psi : \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R}_+ \\ x &\longmapsto \rho_\Psi(x) \end{aligned}$$

avec

$$\rho_\Psi(x) = N \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\Psi(x, x_2, \dots, x_N)|^2 \, dx_2 \dots dx_N \tag{2.9}$$

clairement $\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi(x) dx = N$.

De même on définit l'énergie cinétique des N électrons par

$$\begin{aligned} T_\Psi &= \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\nabla_{x_i} \Psi(X)|^2 \, d^N x \\ &= N \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\nabla_{x_1} \Psi(X)|^2 d^N x \end{aligned} \tag{2.10}$$

On a le résultat suivant.

Théorème 2.1. *Pour tout N et toute $\Psi \in \mathcal{A}L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x)$ avec $\|\Psi\|_2$ il existe une constante K tel que*

$$T_\Psi \geq 2^{2/3} K \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x) \, dx \tag{2.11}$$

Si $\Psi \in \mathcal{A}L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x; \mathbb{C}^{q^N})$, q le nombre d'états de spin ($q = 2$ pour l'électron), et il est normé alors

$$T_\Psi \geq K \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x) \, dx \tag{2.12}$$

avec $K = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3} q^{-2/3}$ [11].

Pour prouver ce théorème dû à Lieb et Thirring on aura besoin du corollaire suivant qui suit du théorème A.1 de l'appendice A.

[11] Remarquons que $K = (4\pi q)^{-2/3} K^c$

Corollaire 2.1. *Si* $e_1 \leq e_2 \leq \ldots \leq 0$ *sont les valeurs propres négatives de* H *(voir théorème A.1) alors*

$$\sum_{i=1}^{\cdots} |e_i| \leq \frac{4\pi}{15\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} |V(x)|^{5/2}\, dx \tag{2.13}$$

Preuve. Soit n_j la multiplicité de l'énergie e_j, alors

$$\sum_{i=1}^{\cdots} |e_i| = \sum_{\substack{j=1 \\ e_j \neq e_{j+1}}}^{\cdots} n_j |e_j| = \int_0^\infty \sum_j \chi_{[0,|e_j|]}(\alpha) n_j \, d\alpha$$

et comme $\sum_j \chi_{[0,|e_j|]}(\alpha) n_j = N_{-\alpha}(V)$ on a

$$\sum_{i=1}^{\cdots} |e_i| = \int_0^\infty N_{-\alpha}(V)\, d\alpha$$

En substituant $N_{-\alpha}(V)$ par son expression (A.1) et en permutant les intégrales on a

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\cdots} |e_i| &\leq \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_0^\infty d\alpha\, \alpha^{-1/2} \left| V(x) + \frac{\alpha}{2} \right|_-^2 \\
&= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_0^{2|V(x)|} d\alpha\, \alpha^{-1/2} \left| V(x) + \frac{\alpha}{2} \right|^2 \\
&\leq \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_0^{2|V(x)|} d\alpha\, \frac{\alpha^{3/2}}{4} \leq \frac{4}{15\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |V(x)|^{5/2}\, dx
\end{aligned}$$

□

Preuve du Théorème 2.1. L'astuce de cette preuve consiste dans l'utilisation de résultats connus pour le problème à une particule.
On va utiliser le corollaire précédent, pour cela posons

$$V(x) = -\beta \rho_\Psi^{2/3}(x) \qquad q\beta^{3/2} \frac{2}{3\pi} = 1$$

avec $\Psi \in \mathcal{A}L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x; \mathbb{C}^{q^N})$, $\rho_\Psi(x)$ définit par (2.9).
Considérons l'hamiltonien de N particules

$$\tilde{H}_N = \sum_{i=1}^N h_i \qquad h_i = -\Delta_{x_i} + V(x_i)$$

avec état fondamental d'énergie E_0, soit aussi $\{e_j\}_{j=1}^{\cdots}$ la partie négative du spectre ponctuel de chaque h_i.
Alors, par le principe variationnel

$$\begin{aligned} E_0 &\leq (\Psi, \tilde{H}_N \Psi) = T_\Psi + \sum_{i=1}^{N} (\Psi, -\beta \rho_\Psi^{2/3}(x_i)\Psi) \\ &= T_\Psi - \beta N \int_{\mathbb{R}^{3N}} \Psi^*(X) \rho_\Psi^{2/3}(x_1) \Psi(X)\, d^N x \\ &= T_\Psi - \beta \int_{\mathbb{R}^3} dx_1\, \rho_\Psi^{2/3}(x_1) \underbrace{N \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\Psi(X)|^2\, dx_2 \dots dx_N}_{\rho_\Psi(x_1)} \end{aligned}$$

d'où

$$E_0 \leq T_\Psi - \beta \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x)\, dx \tag{2.14}$$

Mais on a aussi

$$\begin{aligned} E_0 &\geq q \sum_{i=1}^{\cdots} e_i \\ &\geq -q \frac{4}{15\pi} \beta^{5/2} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x)\, dx \end{aligned} \tag{2.15}$$

car, si k est le nombre d'états (liés) occupés par les N fermions

$$E_0 \geq q \sum_{i=1}^{k} e_i \geq q \sum_{i=1}^{\cdots} e_i$$

si $qk \geq N$; si $qk < N$ on placera les fermions "en plus" dans des état de diffusion avec $T < \epsilon$ pour $\epsilon \to 0$, ceci est possible en plaçant ces fermions assez loin du noyau et aussi assez loin entre eux, de telle sorte que T soit petite quant on veut et que l'on viole pas le principe de Pauli.
De (2.14) et (2.15) on déduit que

$$T_\Psi \geq K \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x)\, dx$$

avec $K = \beta - q\frac{4}{15\pi}\beta^{5/2}$ et on remplaçant la valeur de β

$$K = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi}{2q} \right)^{2/3}$$

□

2.2.5 Théorie de Thomas-Fermi

Définition

Soit

$$\begin{array}{rcl} \rho : \mathbb{R}^3 & \longrightarrow & \mathbb{R}_+ \\ x & \longmapsto & \rho(x) \end{array}$$

une fonction densité, on introduit la fonctionnelle $\mathcal{E}$, de domaine $\mathcal{D}(\mathcal{E})$ à préciser,

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{E} : \mathcal{D}(\mathcal{E}) & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ \rho & \longmapsto & \mathcal{E}[\rho] \end{array}$$

Dans le cas de TF $\mathcal{E}[\rho]$ est donnée par

$$\mathcal{E}^{TF}[\rho] = q^{-2/3}K^c \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{5/3}(x)dx - \int_{\mathbb{R}^3} V(x)\rho(x)\,dx + D(\rho,\rho) + U \qquad (2.16)$$

où

$$V(x) = \sum_{j=1}^{k} \frac{z_j}{|x-R_j|} \qquad (2.17)$$

$$D(f,g) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy\, \frac{f(x)g(y)}{|x-y|} \qquad (2.18)$$

$$U = \sum_{1\leq i<j\leq k} \frac{z_i z_j}{|R_i - R_j|} \qquad (2.19)$$

Pour cette fonctionnelle on a $\mathcal{D}(\mathcal{E}^{TF}) = L^{5/3}(\mathbb{R}^3, dx) \cap L^1(\mathbb{R}^3, dx)$.

Voici une importante propriété de ce cette fonctionnelle

Corollaire 2.2. $\rho \longmapsto \mathcal{E}^{TF}[\rho]$ *est strictement convexe, c'est-à-dire*

$$\mathcal{E}^{TF}[\lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2] \leq \lambda\mathcal{E}^{TF}[\rho_1] + (1-\lambda)\mathcal{E}^{TF}[\rho_2]$$

pour tout $\lambda \in]0,1[$ *et* $\rho_1 \neq \rho_2$ *dans* $\mathcal{D}(\mathcal{E}^{TF})$.

Preuve. Le premier terme est strictement convexe car $f(x) = x^{5/3}$ est strictement convexe sur $[0,\infty[$. Le deuxième terme étant linéaire en ρ est convexe. Pour le terme $D(\rho,\rho)$ on remarque que sa deuxième dérivée fonctionnelle est

$$\frac{\delta^2 D(\rho,\rho)}{\delta\rho(x)\delta\rho(y)} = \frac{1}{|x-y|}$$

et qu'elle est définie positive, en effet

$$(f, |x-y|^{-1} f) > 0 \qquad \forall\, f \neq 0$$

□

L'équation de Thomas-Fermi

Pour $\lambda \geq 0$

$$E^{TF}(\lambda) = \inf_{\rho} \left\{ \mathcal{E}^{TF}[\rho] : \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\, dx = \lambda \right\} \tag{2.20}$$

est l'énergie de Thomas-Fermi pour λ électrons (en toute généralité $\lambda \in \mathbb{R}$). Pour résoudre (2.20) on introduit un multiplicateur de Lagrange μ et on calcule la dérivé fonctionnelle de

$$\mathcal{L}[\rho] = \mathcal{E}^{TF}[\rho] + \mu \left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\, dx - \lambda \right)$$

ceci donne l'*équation de Thomas-Fermi* que voici

$$\tfrac{5}{3} K^c q^{-2/3} \rho^{2/3}(x) = \max\{\phi(x) - \mu, 0\} \tag{2.21}$$

$$\phi(x) = V(x) - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(y) |x-y|^{-1} dy \tag{2.22}$$

Le fait que $\rho(x)$ pourrait être nulle est une conséquence de la convexité de la fonctionnelle. Lorsque $\mu = 0$ on peut écrire

$$-\frac{1}{4\pi} \Delta\phi(x) = -\left(\frac{3}{5} \frac{1}{K^c} q^{2/3} \phi(x) \right)^{3/2} + \sum_{i=1}^{k} z_i \delta(x - R_i) \tag{2.23}$$

Un théorème important

Le théorème suivant résume les principales propriétés de la théorie TF qui seront utiles pour la suite.

Théorème 2.2 ([12]). *Si* $\lambda \leq Z \equiv \sum_{i=1}^{k} z_i$ *alors*

- $\mathcal{E}^{TF}[\rho]$ *a un minimum dans l'ensemble* $\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\, dx = \lambda$.
- *Le minimum* ρ *(appelé* ρ_λ^{TF}*) est unique et satisfait (2.21).* μ *est non négative, et* $-\mu$ *est le potentiel chimique, c'est-à-dire*

$$-\mu = \frac{dE^{TF}(\lambda)}{d\lambda}$$

- *Il n'existe pas d'autre solution pour (2.21) avec* $\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\, dx = \lambda$ *autre que* ρ_λ^{TF}.

- *Lorsque $\lambda = Z$, $\mu = 0$. Autrement $\mu > 0$, c'est-à-dire, $E^{TF}(\lambda)$ est strictement décroissante en λ.*
- *Lorsque λ varie entre 0 et Z, μ varie continûment de $+\infty$ à 0.*
- *μ est une fonction de λ convexe et décroissante.*
- *$\phi_\lambda^{TF}(x) > 0$ pour tout x, λ. Donc lorsque $\lambda = Z$*
$$\tfrac{5}{3} K^c q^{-2/3} \rho_Z^{TF}(x)^{2/3} = \phi_Z^{TF}(x)$$

Si $\lambda > Z$ alors $E^{TF}(\lambda)$ n'est pas un minimum et (2.21) n'a pas de solution avec $\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\,dx = \lambda$. Cependant $E^{TF}(\lambda)$ existe et $E^{TF}(\lambda) = E^{TF}(Z)$ pour $\lambda \geq Z$.

Remarques Les deux point importants qui sortent de ce théorème sont

- $E^{TF}(\lambda)$ est bornée inférieurement,
- le minimum est atteint lorsque $\sum_{i=1}^{k} = \lambda$ c'est-à-dire dans le cas de la neutralité.

2.2.6 Stabilité de l'atome à N électrons

Graçe au théorème 2.1 on peut, à partir de (1.13), écrire

$$E_\Psi \geq K \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x)dx + W_\Psi$$

avec

$$W_\Psi = -\int_{\mathbb{R}^3} \frac{z}{|x|} \rho_\Psi(x)\,dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} B(X)|\Psi(X)|^2\,d^N x \tag{2.24}$$

où on a utilisé le fait que

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{|x_i|} |\Psi(X)|^2 \right) d^N x = \int_{\mathbb{R}^3} dx \frac{1}{|x|} \underbrace{N \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\Psi(x, x_2, \ldots, x_N)|^2\,dx_2 \ldots dx_N}_{\rho_\Psi(x)}$$

On voudra reécrire le terme en $B(X)$ plus simplement, pour cela on utilise la *théorie de Thomas-Fermi* pour le cas de l'atome donc, en particulier, à la fonctionnelle (2.16) il faudra enlever le terme U et remplacer $V(x)$ par $\frac{z}{|x|}$. Remarquons que ρ est remplacé par ρ_Ψ.

Le lien entre la théorie de TF et le problème de la minimisation de l'énergie E_Ψ est donné par le théorème suivant.

Théorème 2.3 ([15]). *Soit*

$$I_\Psi = \sum_{1\le i<j\le N} (\Psi, |x_i - x_j|^{-1}\Psi)$$

on définit $D_\Psi = D(\rho_\Psi, \rho_\Psi)$ *et on écrit* $I_\Psi = F_\Psi + D_\Psi$*, alors*

$$I_\Psi - D_\Psi = F_\Psi \ge -\zeta \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{4/3}(x)\,dx \tag{2.25}$$

En appliquant ce résultat on voit que l'on peut écrire

$$E_\Psi \ge \mathcal{E}^{TF}[\rho_\Psi] - \zeta \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{4/3}(x)\,dx}_{B_\Psi}$$

Or, le terme B_Ψ peut être minoré comme suit

$$B_\Psi = \|\rho_\Psi^{4/3}\|_1 \le \|\rho_\Psi^{1/2}\|_2 \|\rho_\Psi^{5/6}\|_2 = N^{1/2}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi^{5/3}(x)\,dx\right)^{1/2}$$

et peut être contrôlé par le terme d'énergie cinétique (la différence croît comme la racine de ce terme).
Donc, à un erreur contrôlable près,

$$E_\Psi \ge \mathcal{E}^{TF}[\rho_\Psi]$$

Si on montre que $\inf_{\rho_\Psi} \mathcal{E}^{TF}[\rho_\Psi]$, sous la condition $\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi(x)\,dx = N$, est fini on aura montré que E_Ψ possède une borne inférieure finie, ce qui assure la stabilité de première espèce.
Les résultats de la théorie TF (théorème 2.2) montrent que $E^{TF}(N,z)$ est bornée inférieurement et que l'on a

$$E > E^{TF}(N,z) \ge E^{TF}(z,z) \ge -C > -\infty$$

d'où la stabilité de première espèce.
On va maintenant trouver la forme exacte de la borne, on a le théorème suivant.

Théorème 2.4. *Si* $\mathcal{E}[\rho]$ *admet un minimum, alors*

$$E^{TF}(N,z) \ge E^{TF}(z,z) = -Cz^{7/3} \tag{2.26}$$

avec $C = -E^{TF}(1,1) > 0$*, explicitement* $C = 2.21\frac{1}{K(4\pi)^{2/3}}$ [12].

Preuve. Dans cette preuve on n'écrit pas l'indice Ψ pour ρ et TF pour $\mathcal{E}$. L'inégalité suit du théorème 2.2, pour l'égalité considérons le changement d'échelle suivant

$$\begin{aligned} V_z(x) &= z^{4/3}V(z^{1/3}x) \qquad \text{avec} \quad V(x) = -\frac{z}{|x|} \\ \rho_z(x) &= z^2\rho(z^{1/3}x) \end{aligned}$$

alors

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{V_z}[\rho_z] &= z^{7/3}\mathcal{E}_V[\rho] \\ \int_{\mathbb{R}^3} \rho_z(x)\,dx &= z\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\,dx \end{aligned}$$

(simple changement de variable), d'où

$$E^{TF}(N,z) = z^{7/3}E^{TF}\left(\frac{N}{z},1\right)$$

□

Pour résoudre le problème de la stabilité de première espèce on a fait appel à la théorie de Thomas-Fermi, et on a justifié son "utilisation" par le résultat du théorème 2.3. On va maintenant donner un résultat important qui montre que la théorie de Thomas-Fermi est asympthotiquement exacte.

Théorème 2.5 ([13]). *Fixons un $0 < \lambda \leq 1$ et soit $z_N = \frac{N}{\lambda}$ pour $N \in \mathbb{N}^*$. Soit $E(N, z_N)$ l'état fondamental donné par (1.14) pour un atome avec charge nucléaire z_N et N électrons. Soit $E^{TF}(N, z_N)$ l'énergie de la théorie de Thomas-Fermi avec $K = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3}$ (pas celle du théorème 2.1).*
Alors

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(N,z_N)}{E^{TF}(N,z_N)} = \lim_{N\to\infty} \frac{E(N,z_N)}{z^{7/3}E^{TF}(\lambda,1)} = 1 \tag{2.27}$$

Si $\lambda > 1$ es fixé et $z_N = \frac{N}{\lambda}$ alors (2.27) reste vrai avec les remplacements suivantes

$$\begin{aligned} E^{TF}(N,z_N) &\longrightarrow E^{TF}(z_N,z_N) \\ E^{TF}(\lambda,1) &\longrightarrow E^{TF}(1,1) \end{aligned}$$

Remarque Remarquons que le comportement de la borne en puissance de $z^{7/3}$, obtenue en considérant le principe d'exclusion de Pauli, est différente de l'évaluation de celle ci sans tenir compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde, en effet dans ce cas on aurait une borne en z^2 car l'énergie de l'état fondamental serait N (nombre d'électrons) fois l'énergie de l'électron de l'atome d'hydrogène (qui varie justement en z^2).

2.3 N électrons et k noyaux

On considère ici le problème "complet", c'est-à-dire N électrons et k noyaux, avec l'hamiltonien (quantifié) donné par (1.5). Le but est maintenant de prouver la stabilité de deuxième espèce.

2.3.1 Considérations sur la loi linéaire

La stabilité de deuxième espèce (1.16) est caractérisé par une inégalité linéaire dans le nombre de particules, si ceci assure la stabilité du système en limite thermodynamique, il n'assure pas l'existence de grandeurs tel que l'énergie libre, où en général la thermodynamique. Pour ceci il faut que asympthotiquement (nombre de particules $\to \infty$) la loi (1.16) soit un égalité, c'est-à-dire que se soit la loi correcte pour l'énergie.
On a le théorème suivant.

Théorème 2.6 ([10]). *Il existe $A'(z)$ tel que pour $k = \frac{N}{z}$ (neutralité)*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} E(N, k, z) = -A'(z) \tag{2.28}$$

Remarque L'importance de la loi linéaire peut être illustrée par l'exemple simple suivant.
Considérons n particules décrites par l'ensemble canonique, on définit l'*énergie libre* par particule $f(\beta, v) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} F(\beta, V, n)$, où clairement $F(\beta, V, n) = -\frac{1}{\beta} \ln Q(\beta, V, n)$ et la fonction de partition quantique $Q(\beta, V, n) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H(n)}$. Alors

$$f(\beta, v) = -\frac{1}{\beta} \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H(n)}$$

Supposons $H(n) = -Bn^q \geq -Bn$ avec $0 < q \leq 1$, alors, en considérant que la contribution de l'état fondamental[12], on a

$$f(\beta, v) = \lim_{n\to\infty} (-B) n^{q-1} = 0 \qquad \text{si} \quad q < 1$$

donc on voit que pour avoir une thermodynamique il faut que $H(n) = -Bn$ lorsque $n \to \infty$.

[12]Bien que pour $T > 0$ le terme dominant est celui de l'état fondamental, ceci est un hypothèse pour simplifier l'exemple

2.3.2 Non liaison dans la théorie de Thomas-Fermi

Pour le cas général envisagé ici la fonctionnelle de Thomas-Fermi (2.16) est complète et ρ est remplacé par ρ_Ψ.
Un important résultat de la théorie de Thomas-Fermi, et qui sera essentiel pour prouver la stabilité de deuxième espèce est le suivant.

Théorème 2.7 (no binding). *Pour les suites strictement positives $\{z_i\}_{i=1}^k$ et $\{R_i\}_{i=1}^k$ et pour tout $1 \leq m < k$*

$$\begin{aligned} E^{TF}\left(\lambda = \sum_{i=1}^k z_i; Z; R\right) \geq\ & E^{TF}\left(\lambda_1 = \sum_{i=1}^m z_i; z_1, \ldots, z_m; R_1, \ldots, R_m\right) \\ +\ & E^{TF}\left(\lambda_2 = \sum_{i=m+1}^k z_i; z_{m+1}, \ldots, z_k; R_{m+1}, \ldots, R_k\right) \end{aligned} \tag{2.29}$$

où $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ et $E^{TF}(\ldots) = \inf_{\rho_\Psi} \mathcal{E}^{TF}[\rho_\Psi]$ avec $\mathcal{E}^{TF}[\rho_\Psi]$ la fonctionnelle (2.16).

Avant de prouver ce théorème faisons quelques remarques.

Remarques

- L'inégalité est valable pour l'hamiltonien complet, en effet le terme de répulsion nucléaire est le terme essentiel pour la non liaison.
- La non liaison dans la théorie de Thomas-Fermi ne correspond pas à la réalité physique.

La preuve du théorème 2.7 utilise le lemme suivant dû à Teller.

Lemme 2.2 (neutral case). *Soit $\{R_i\}_{i=1}^k$ fixée. Soient $\phi_1^{TF}(x)$ et $\phi_2^{TF}(x)$ les potentiels de Thomas-Fermi correspondants à*

$$V_1(x) = \sum_{i=1}^k z_i^1 |x - R_i|^{-1} \qquad \textit{suite} \quad \left\{z_i^1\right\}_{i=1}^k$$

$$V_2(x) = \sum_{i=1}^k z_i^2 |x - R_i|^{-1} \qquad \textit{suite} \quad \left\{z_i^2\right\}_{i=1}^k$$

Supposons

$$z_i^1 \leq z_i^2 \quad \forall\, i$$

alors

$$\phi_1^{TF}(x) \leq \phi_2^{TF}(x) \qquad \forall\, x \neq \{R_i\}_{i=1}^k \tag{2.30}$$

Preuve. On ne met pas l'indice TF pour ϕ. Soit $\mathcal{B} = \{x : \phi_2(x) < \phi_1(x)\}$, on va monter que $\mathcal{B} = \emptyset$.
Supposons que $\mathcal{B}$ ne soit pas vide. Soit $z_i^1 > z_i^2$ pour $i = 1, \dots, m$ et $z_i^1 = z_i^2$ pour $i = m+1, \dots, k$ (simple renumerotation des variables). Comme $\phi_j(x)|x - R_k| \longrightarrow z_k^j$, pour $x \to R_k$, $j = 1, 2$ et le fait que $z_i^1 \leq z_i^2 \quad \forall i$ on a que $\mathcal{B} \cap B(R_i, \epsilon) = \emptyset \; \forall R_i$.
Comme sur $\mathcal{A} = \mathbb{R}^3 \backslash \{R_1, \dots, R_k\}$ les fonctions $\phi_i(x), i = 1, 2$, sont continues $\mathcal{B}$ est un ouvert, en effet si $\psi(x) = \phi_1(x) - \phi_2(x)$ alors $\psi^{-1} \restriction_{\mathcal{A}} (]0, \xi[) = \mathcal{B}$, avec $\xi = \sup_x \psi(x)$. Or $\psi(x) = \phi_1(x) - \phi_2(x)$, est une fonction continue et strictement positive dans $\mathcal{B}$, par (2.23) on a

$$-(4\pi)^{-1} \Delta\psi(x) = \alpha \left(\phi_2^{3/2}(x) - \phi_1^{3/2}(x) \right) < 0$$

α une constante positive; donc $\Delta\psi(x) > 0$ et $\psi(x)$ est une fonction sous-harmonique [20]: par le *principe du maximum* comme $\psi(x)$ n'est pas une constante le maximum de $\psi(x)$ est atteint pour $x \in \partial\mathcal{B} \cup \{\infty\}$. Comme

$$\lim_{|x| \to \infty} \psi(x) = 0$$
$$\psi(x)\Big|_{x \in \partial\mathcal{B}} = 0$$

le maximum de ψ est zéro et $\psi(x) \leq 0$ sur $\mathcal{B}$, d'où contradiction avec le fait que dans $\mathcal{B}$ $\psi(x) > 0$ et donc $\mathcal{B} = \emptyset$. □

Preuve du Théorème 2.7. Soit $\alpha > 0$, considérons les trois systèmes neutres ($\mu = 0$) et posons $\lambda^{(\alpha)} = \alpha \sum_{i=1}^m z_i + \sum_{i=m+1}^k z_i$, $\lambda_1^{(\alpha)} = \alpha \sum_{i=1}^m z_i$, $\lambda_2 = \sum_{i=m+1}^k z_i$.
On définit

$$\begin{aligned} f(\alpha) \;=\;& E^{TF}\left(\alpha z_1, \dots, \alpha z_m, z_{m+1}, \dots, z_k; R\right) \\ & - E^{TF}\left(\alpha z_1, \dots, \alpha z_m; R_1, \dots R_m\right) \\ & - E^{TF}\left(z_{m+1}, \dots, z_k; R_{m+1}, \dots R_k\right) \end{aligned}$$

On va montrer que $f(1) \geq 0$ ce qui correspond à l'affirmation du théorème. Commençons par remarquer que $f(0) = 0$, donc si l'on montre que $\frac{df(\alpha)}{d\alpha} \geq 0$ on aura automatiquement le résultat cherché.
De (2.16) et (2.20) on a que

$$\frac{dE^{TF}}{dz_i} = \frac{\partial E^{TF}}{\partial z_i} + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial \rho_{\{z_i\}}^{TF}}{\partial z_i} \underbrace{\frac{\delta E^{TF}}{\delta \rho^{TF}}}_{=0}$$

ainsi que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E^{TF}}{\partial z_i} &= -\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Psi(y)|y-R_i|^{-1}dy + \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{k} z_j|R_i-R_j|^{-1} \\
&= \lim_{x\to R_i} \left(\phi^{TF}(x) - z_i|x-R_i|^{-1}\right)
\end{aligned}$$

Alors

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{i=1}^{m} \lim_{x\to R_i} z_i \underbrace{\left(\phi_1^{TF}(x) - \phi_2^{TF}(x)\right)}_{\eta_\alpha(x)}$$

où $\phi_1^{TF}(x)$ est associé à $\{\alpha z_1, \ldots, \alpha z_m, z_{m+1}, \ldots, z_k; R\}$ et $\phi_2^{TF}(x)$ est associé à $\{\alpha z_1, \ldots, \alpha z_m; R_1, \ldots, R_m\}$.
La preuve se conclut à l'aide du lemme de Teller: $\phi_1^{TF}(x) \geq \phi_2^{TF}(x)$ d'où $\eta_\alpha(x) \geq 0$. $\square$

Le résultat de ce théorème, connu sous le nom de *non liaison dans la théorie de Thomas-Fermi*, se généralise ainsi.

Corollaire 2.3. *Il existe* $\{N_1, \ldots, N_k\}$ *avec* $\sum_{i=1}^k N_i = N$ *tel que*

$$E^{TF}(N,k,Z,R) \geq \sum_{i=1}^{k} E^{TF}_{atome}(N_i, z_i)$$

avec $E^{TF}_{atome}(N_i, z_i)$ *solution de (2.20).*
En plus[13] *le minimum est atteint pour* $N_i = z_i, 1 \leq i \leq k$

$$E^{TF}\left(N = \sum_{i=1}^{k} z_i, k, Z, R\right) \geq -C\sum_{i=1}^{k} z_i^{7/3} \tag{2.31}$$

car $E^{TF}_{atome}(z,z) = -Cz^{7/3}$ *selon le théorème 2.4.*

2.3.3 Stabilité de deuxième espèce

Le corollaire 2.3 donne déjà une première "contribution" pour établir la stabilité de deuxième espèce (contribution linéaire dans le nombre de noyaux), mais il manque la "contribution" des électrons, pour trouver celle-ci il nous faut le théorème suivant.

[13] En se base sur les résultats connus pour l'atome

Théorème 2.8. *Soit $X \in \mathbb{R}^{3N}$, on définit*

$$V_X(y) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{|y - x_i|}$$

Soit $\gamma > 0$ et $\rho \in L^{5/3}(\mathbb{R}^3, dx) \cap L^1(\mathbb{R}^3, dx)$, $\rho \geq 0$. Alors

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|} \quad &\geq \quad -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \, \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho(y) V_X(y) \, dy \\ & \quad -2.21 \frac{N}{\gamma} - \gamma \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{5/3}(y) \, dy \end{aligned} \tag{2.32}$$

Preuve. Considérons la fonctionnelle (2.16) avec $K^c = \gamma$, $k = N$, $q = 1$, $z_i = 1$ et $R_i = x_i$, $1 \leq i \leq N$, soit $\lambda = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x) \, dx$.
Alors, par le principe variationnel, $\mathcal{E}[\rho] \geq E^{TF}(\lambda)$ et par le corollaire 2.3[14] $E^{TF}(\lambda) \geq -2.21 \frac{N}{\gamma}$, d'où

$$\mathcal{E}[\rho] \geq -2.21 \frac{N}{\gamma}$$

donc

$$\gamma \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{5/3}(x) \, dx - \int_{\mathbb{R}^3} V_X(x)\rho(x) \, dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \, \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} + U \geq -2.21 \frac{N}{\gamma}$$

et comme $U = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|}$ on a le résultat cherché. □

On est maintenant au point pour montrer la stabilité, en effet ce théorème permet de améliorer l'inégalité entre l'énergie de l'hamiltonien et celle de Thomas-Fermi, ce qui fait resortir une "contribution des électrons".

Théorème 2.9. *Si $\Psi(X) \in \mathcal{A}L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^N x; \mathbb{C}^{q^N})$ avec $\|\Psi\|_2 = 1$, alors pour tout $\gamma > 0$ tel que $\alpha = K - \gamma > 0$ on a*

$$E(N, k, Z) \geq -2.21 \left(\frac{N}{\gamma} + \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^{k} z_i^{7/3} \right) \tag{2.33}$$

et

$$\gamma_{optimal} = K \left[\left(\sum_{i=1}^{k} \frac{z_i^{7/3}}{N} \right)^{1/2} + 1 \right]^{-1}$$

[14]Rappel: $C = 2.21 \frac{q^{2/3}}{K^c}$

dans ce cas

$$E(N,k,Z) \geq -2.21\frac{N}{K}\left[1+\left(\sum_{i=1}^{k}\frac{z_i^{7/3}}{N}\right)^{1/2}\right]^2 \tag{2.34}$$

Preuve. On parte de (2.24) après avoir ajouté le terme de répulsion nucléaire U et remplacé $\frac{z}{|x|}$ par $V(x)=\sum_{i=1}^{k}\frac{z_i}{|x-R_i|}$. Le terme en $B(X)$ de (1.5) peut être majoré à l'aide du théorème 2.8 avec $\rho=\rho_\Psi$, on a

$$\begin{aligned}\left(\Psi, \sum_{1\leq i<j\leq N}|x_i-x_j|^{-1}\Psi\right) \geq & -\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}dx\int_{\mathbb{R}^3}dy\,\frac{\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|}\\ & +\int_{\mathbb{R}^3}dx\int_{\mathbb{R}^3}dy\,\frac{\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|}\\ & -2.21\frac{N}{\gamma}-\gamma\int_{\mathbb{R}^3}\rho_\Psi^{5/3}(y)\,dy\end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que

$$\sum_{i=1}^{N}\int_{\mathbb{R}^3}dy\int_{\mathbb{R}^{3N}}d^Nx\,\rho_\Psi(y)\frac{1}{|y-x_i|}|\Psi(X)|^2=\int_{\mathbb{R}^3}dx\int_{\mathbb{R}^3}dy\,\frac{\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|}$$

d'où

$$\begin{aligned}E_\Psi \geq\ & \alpha\int_{\mathbb{R}^3}\rho_\Psi^{5/3}(x)\,dx-\int_{\mathbb{R}^3}V(x)\rho_\Psi(x)\,dx\\ & +\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}dx\int_{\mathbb{R}^3}dy\,\frac{\rho_\Psi(x)\rho_\Psi(y)}{|x-y|}+U-2.21\frac{N}{\gamma}\end{aligned}$$

avec $\alpha=K-\gamma$. Comme les quatres premiers termes correspondent à la fonctionnelle de Thomas-Fermi pour l'atome, avec le changement $q^{-2/3}K^c \longrightarrow \alpha$, on a $E_\Psi \geq \mathcal{E}_\alpha^{TF}[\rho_\Psi]-2.21\frac{N}{\gamma}$. Par le le fait que $\mathcal{E}_\alpha^{TF}[\rho_\Psi] \geq E_\alpha^{TF}(\lambda)$ et le corollaire 2.3 il suit que

$$E(N,k,Z)=\inf_\Psi E_\Psi \geq -2.21\left(\frac{1}{\alpha}\sum_{i=1}^{k}z_i^{7/3}+\frac{N}{\gamma}\right)$$

$\gamma_{optimal}$ s'obtient en minimisant la fonction

$$f(\gamma)=\frac{1}{\gamma}+\frac{1}{K-\gamma}\sum_{i=1}^{k}\frac{z_i^{7/3}}{N}$$

$\square$

On a le corollaire suivant.

Corollaire 2.4. *Dans le cadre du théorème 2.9 on a*

$$\begin{aligned} E(N,k,Z) &\geq -4.42\frac{1}{K}\left(N+\sum_{i=1}^{k} z_i^{7/3}\right) \\ &\geq -4.42\frac{1}{K}(N+kz^{7/3}) \\ &\geq -\underbrace{4.42\frac{z^{7/3}}{K}}_{=A(z)}(N+k) \end{aligned} \tag{2.35}$$

Preuve. Utiliser l'inegalité $(1+\sqrt{a})^{1/2} \leq 2a+2$ et prendre $z \geq z_i$, $1 \leq i \leq k$. □

Conclusion On a donc montré l'existence d'une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental de l'hamiltonien (1.5) (quantifié) qui est linéaire dans le nombre de noyaux et d'électrons, ceci assure la stabilité de deuxième espèce pour le système coulombien le plus générale, c'est-à-dire la matière (neutre).

Chapitre 3

Stabilité de l'atome à un électron avec champ magnétique classique

Dans ce chapitre on étudie la stabilité de l'*atome à un électron* en présence d'un *champ magnétique classique*.
Le champ B introduit n'est pas un champ extérieur, mais il traduit l'effet de la présence d'un champ électromagnétique; en fait ceci est un approche semi-classique du problème qui consisterait à quantifier le champ électromagnétique et traiter le problème du point de vu de l'interaction de la matière non relativiste avec l'électrodynamique quantique (QED).

3.1 Modification de l'hamiltonien et stabilité

Remarque Les unités utilisés ici sont

$$[L] = \frac{\hbar^2}{2me^2} \equiv l \qquad [E] = \frac{2me^4}{\hbar^2} = 2mc^2\alpha^2 = 4[Ry] \qquad [|B|] = \frac{e}{l^2\alpha}$$

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ étant la constante de structure fine.
Avec l'introduction d'un champ magnétique l'hamiltonien étudié au chapitre 2 doit être modifié. En suivant le principe de jauge [18], nous sommes conduits à l'hamiltonien suivant[1]

$$H' = (p - A)^2 - \frac{z}{|x|} \tag{3.1}$$

[1]Ceci est équivalent à la substitution de la dérivé ordinaire par la dérivé covariante

avec $p = -i\nabla$ l'opérateur impulsion en représentation de configuration, $A(x)$ le potentiel vecteur ($B = \operatorname{rot} A$) et x l'opérateur position.

Pour ce qui concerne la stabilité, cette modification n'apporte pas de changements intéressants car l'effet de l'introduction du potentiel vecteur ne fait qu'augmenter l'énergie de l'état fondamental comme affirme le lemme suivant.

Lemme 3.1. *Soit* $H_0 = p^2 - \frac{z}{|x|}$, *alors*

$$\inf \operatorname{spec}(H') \geq \inf \operatorname{spec}(H_0) \tag{3.2}$$

Preuve. Remarquons que pour A auto-adjoint

$$\inf \operatorname{spec}(A) = \inf_{\psi \neq 0} \left\{ \lim_{t\to\infty} -t^{-1} \ln \left(\psi, e^{-tA}\psi\right) \right\} \tag{3.3}$$

Soit $H(A) = H'$ et $H(0) = H_0$, comme $H(A)$ est auto-adjoint $e^{-tH(A)}$ est positif, donc

$$\begin{aligned}
\left(\phi, e^{-tH(A)}\phi\right) &= \left| \left(\phi, e^{-tH(A)}\phi\right) \right| \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \, |\phi^*(x)| \left|(x|e^{-tH(A)}|y)\right| |\phi(y)| \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \, |\phi(x)| (x|e^{-tH(0)}|y) |\phi(y)| \\
&= \left(|\phi|, e^{-tH(A)}|\phi|\right)
\end{aligned}$$

la deuxième inégalité suit du lemme A.1 de l'appendice A (équation (A.2)). Alors

$$\lim_{t\to\infty} -t^{-1} \ln \left(|\phi|, e^{-tH(0)}|\phi|\right) \leq \lim_{t\to\infty} -t^{-1} \ln \left(\phi, e^{-tH(A)}\phi\right)$$

et donc, comme ϕ est réelle (on connaît la solution pour le problème de $H(0)$), on peut substituer $|\phi|$ avec ϕ ce qui donne

$$\inf_{\phi\neq 0} \left\{ \lim_{t\to\infty} -t^{-1} \ln \left(\phi, e^{-tH(0)}\phi\right) \right\} \leq \inf_{\phi\neq 0} \left\{ \lim_{t\to\infty} -t^{-1} \ln \left(\phi, e^{-tH(A)}\phi\right) \right\}$$

□

Le problème devient intéressant lorsque on considère le couplage entre les spins des électrons et le champ magnétique, l'hamiltonien à étudier est donc

$$\begin{aligned}
H &= (p - A)^2 - \frac{z}{|x|} - \sigma \cdot B \\
&= [\sigma \cdot (p - A)]^2 - \frac{z}{|x|}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

où σ_1, σ_2, σ_3 sont les trois matrices de Pauli.

Lemme 3.2. *Si $E_0(B, z)$ est l'énergie de l'état fondamental de (3.4) alors*

$$\begin{aligned} E_0(B,z) &\quad \textit{est fini} && \textit{si} \quad |B| < \infty \\ E_0(B,z) &\longrightarrow -\infty && \textit{si} \quad |B| \to \infty \end{aligned}$$

Remarque Dans [3] on montre que pour l'hamiltonien H' (3.1) (avec $z = 1$, B constant selon e_z et A pris dans la jauge symétrique) l'énergie de l'état fondamental vaut[2]

$$\begin{aligned} E'_0(B) = B - \frac{1}{4}\left[\ln\left(\frac{B}{2}\right)\right]^2 + \ln\left(\frac{B}{2}\right)\ln_2\left(\frac{B}{2}\right) - (\ln 2 - \tfrac{1}{2}\gamma_E)\ln\left(\frac{B}{2}\right) \\ - \left[\ln_2\left(\frac{B}{2}\right)\right]^2 + 2(\ln 2 - 1 - \tfrac{1}{2}\gamma_E)\ln_2\left(\frac{B}{2}\right) + \mathcal{O}(1) \end{aligned}$$

avec $\gamma_E \approx 0.58$ la constante d'Euler et $\ln_2(x) = \ln[\ln(x)]$.
Comme pour un champ B constant la contribution à l'énergie du terme d'interaction spin-champ de l'hamiltonien (3.4) est B on voit que pour $B \to \infty$ l'énergie $E_0(B, z = 1)$ diverge comme $-\ln(B)^2$ ce qui “prouve” le lemme précédent.

Pour trouver une borne inférieure, qui ne dépend pas de B, il faut introduire l'énergie du champ magnétique, celle ci s'exprime (dans les unités choisies) par

$$\epsilon \int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\,dx \qquad \epsilon^{-1} = 8\pi\alpha^2 \tag{3.5}$$

Définition 3.1. *Soit $E_0(B, z)$ l'énergie de l'état fondamental de (3.4) on définit*

$$E(z) = \inf_B \left\{ E_0(B,z) + \epsilon \int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\,dx \right\} \tag{3.6}$$

et

$$E_\psi(B,z) = (\psi, H\psi) + \epsilon \int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\,dx$$

Remarquons que dans (3.4) on a pris un facteur giromagnétique $g = 2$, en général le couplage spin-champ s'écrit $-\frac{g}{2}\sigma \cdot B$, le lemme suivant montre que si on écrit le couplage ainsi avec $g > 2$ on n'a plus de stabilité.

[2]Remarque: Dans [3] les unités de B sont $\frac{1}{4}$ $[|B|]$ et on les utilise dans cette remarque

Lemme 3.3. *Pour $z \geq 0$ et $g > 2$ on a $E(z) = -\infty$.*

Preuve. On montre ceci pour $z = 0$, pour $z > 0$ le terme coulombien dans H ne produit pas d'augmentation d'énergie.
Soit un cube $\Lambda = L^3$, considérons le champ magnétique suivant

$$\begin{cases} B(0,0,1) & \text{si } x \in \Lambda, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Le potentiel vecteur pris dans la jauge symétrique est[3]

$$\begin{cases} \frac{B}{2}(-y,x,0) & \text{si } x \in \Lambda, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Soit

$$\psi(x) = \begin{cases} C(1,0)e^{-\frac{B}{4}\left(x^2+y^2\right)} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) & \text{si } |z| \leq \frac{L}{2}, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

l'orbital de Landau de l'état fondamental (C étant une constante de normalisation). Commençons à établir trois inégalités utiles dans suite.

$$\int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\,dx = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3 \setminus \Lambda} B^2(x)\,dx}_{\leq B^2L^3} + \underbrace{\int_{\Lambda} B^2(x)\,dx}_{=B^2L^3} \leq 2B^2L^3 \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned} (\psi, \sigma \cdot B\psi) &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi(x)^+ \sigma \cdot B(x)\psi(x)\,dx \\ &\geq \int_{\Lambda} \psi(x)^+ B\psi(x)\,dx \geq \tfrac{1}{2}B \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$\begin{aligned} \left(\psi, [\sigma \cdot (p-A)]^2\,\psi\right) &= \left(\psi, (p-A)^2\psi\right) - (\psi, \sigma \cdot B\psi) \\ &= B + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right) - B + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}, \frac{1}{L}\right) \\ &\leq \frac{1}{4}\left(\frac{g}{2} - 1\right) B \end{aligned} \tag{3.9}$$

la dernière inégalité étant valable pour L assez grand.
Or

$$(p-A)^2 - \frac{g}{2}\sigma \cdot B = [\sigma \cdot (p-A)]^2 - \left(\frac{g}{2} - 1\right)\sigma \cdot B$$

[3] Pour être précis il faudrait introduire un cutoff sur $A(x)$ de telle sorte que cette fonction soit au moins de classe C^2

d'où

$$E_\psi(B, z = 0) \leq -\frac{1}{4}\left(\frac{g}{2} - 1\right) B + 2\epsilon B^2 L^3$$

Maintenant considérons le changement d'échelle

$$\begin{aligned} \psi_\lambda(x) &= \lambda^{3/2}\psi(\lambda x) \\ A_\lambda(x) &= \lambda A(\lambda x) \\ B_\lambda(x) &= \lambda^2 B(\lambda x) \qquad \lambda > 0 \end{aligned}$$

clairement $\inf_{\psi,B} E_\psi(B,z) \leq \inf_{\psi_\lambda, B_\lambda} E_{\psi_\lambda}(B_\lambda, z)$, car $\{\psi_\lambda, A_\lambda, B_\lambda\}$ est une sous-classe de fonctions d'onde, de potentiels vecteurs et champ magnétiques. En utilisant (3.7)-(3.8)-(3.9) on trouve

$$E_{\psi_\lambda}(B_\lambda, z = 0) \leq -\frac{1}{4}\left(\frac{g}{2} - 1\right) B\lambda^2 + 2\epsilon B^2 L^3 \lambda$$

et pour $\lambda \to \infty$ $E_{\psi_\lambda}(B_\lambda, z = 0) \longrightarrow -\infty$. $\square$

3.2 Présentation des résultats et commentaires

3.2.1 Résultats

1. On montre qu'il existe un z critique (z_c) tel que

$$\begin{array}{ll} E(z) \quad \text{est fini} & \text{si} \quad z < z_c \\ E(z) = -\infty & \text{si} \quad z > z_c \end{array}$$

   avec

$$z_c = \inf \frac{\epsilon \int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\, dx}{(\psi, |x|^{-1}\psi)}$$

2. On montre que pour un champ B qui, au voisinage du noyau, est constant en direction et arbitrairement grand en module on a toujours la stabilité de l'atome à un électron (le champ B qui cause la divergence de $E(z)$ pour $z > z_c$ est, proche du noyau, fortement inhomogène en direction et module). On donne aussi un exemple de spineur ψ et champ A pour les quels $z_c < \infty$.

3.2.2 Commentaires

1. Le fait que $z_c \neq \infty$ est du au fait que l'équation $\sigma \cdot (p - A)\psi = 0$ possède une solution non triviale pour $\psi \in H^1$ [4] et $A \in L^6$.

2. Le fait que pour $z > z_c$ on a $E(z) = -\infty$ peut se comprendre ainsi: prenons ψ tel que $\sigma \cdot (p - A)\psi = 0$, alors

$$E_\psi(B, z) = -z(\psi, |x|^{-1}\psi) + \epsilon \int B^2(x)\, dx$$

considérons le changement d'échelle du lemme 3.3, alors on trouve

$$E_{\psi_\lambda}(B_\lambda, z) = \lambda \left\{ -\int \frac{z}{|x|} |\psi(y)|^2\, dy + \epsilon \int B^2(y)\, dy \right\}$$

et on voit que si $\{\dots\}$ est négative lorsque $\lambda \to \infty$ $E_{\psi_\lambda}(B_\lambda, z) \longrightarrow -\infty$. Donc l'infimum est fini seulement pour $z < z_c$.

3. Le lemme 3.3 montre que pour $g > 2$ on n'a pas de stabilité, or le vrai g de l'électron est plus grand que 2, c'est l'effet des corrections radiatives (correction de vertex) de l'électrodynamique quantique (QED), ceci a donc des graves conséquences; cependant il faut réaliser que si on voudrais tenir compte de cette correction à g il faudrait considérer toutes les effets dus à la QED, ceci c'est pas l'objectif de ce chapitre.

3.3 Classes de fonctions

Dans l'appendice B on trouve des préliminaires mathématiques pour la suite.

On introduit la classe de fonctions

$$\mathcal{C} = \left\{ (\psi, A) : \psi \in H^1(\mathbb{R}^3), \|\psi\|_2 = 1; A \in L^6(\mathbb{R}^3), \operatorname{div} A = 0, \nabla A \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\} \tag{3.10}$$

Pour $(\psi, A) \in \mathcal{C}$ la fonctionnelle suivante "généralise" l'énergie

$$\mathcal{E}(\psi, A) = \|\sigma \cdot (p - A)\, \psi\|_2^2 + \epsilon \|B\|_2^2 - z(\psi, |x|^{-1}\psi) \tag{3.11}$$

où toutes les termes sont biens définis pour $(\psi, A) \in \mathcal{C}$.

Définition 3.2. *L'énergie de l'état fondamental est*

$$E(z) = \inf \{\mathcal{E}(\psi, A) : (\psi, A) \in \mathcal{C}\} \tag{3.12}$$

On introduit aussi la classe

$$\mathcal{F} = \{(\psi, A) : (\psi, A) \in \mathcal{C}, \sigma \cdot (p - A)\psi = 0\} \tag{3.13}$$

[4] Voir l'appendice B pour la définition de H^1

3.4 La stabilité et la formule pour z_c

3.4.1 Le théorème fondamental

On va maintenant établir un théorème fondamental pour la dérivation de z_c et donc, indirectement la divergence de l'énergie pour $z > z_c$.

Théorème 3.1. *Soit ψ_n un suite de fonctions sur $\mathbb{R}^3$ spineur-évaluées, et A_n une suite de champs vectoriels sur $\mathbb{R}^3$ tel que (pour $1 < p < \infty$ fixé)*

(i) $d_1 \leq \|\psi_n\|_2 \leq d_2$ *pour des constantes* $d_2 \geq d_1 > 0$

(ii) $\|\nabla\psi_n\|_2 \to \infty$ *lorsque* $n \to \infty$

(iii) $\|A_n\|_p \leq D\|\nabla\psi_n\|_2^s$ *pour une* $D > 0$, *où* $s = 1 - \frac{3}{p}$

(iv) $\|\sigma \cdot (p - A_n)\psi_n\|_2 \leq C_n\|\nabla\psi_n\|_2$ *pour une suite* $\{C_n\}_{n=1}^{\infty}$ *avec* $C_n \to 0$ *lorsque* $n \to \infty$.

On définit $1/\lambda_n \equiv \|\nabla\psi_n\|_2$, $\phi_n(x) \equiv \lambda_n^{3/2}\psi_n(\lambda_n x)$ *et* $\alpha_n(x) \equiv \lambda_n A_n(\lambda_n x)$. *Alors*

(a) $\liminf_{n\to\infty} \|\alpha_n\|_p \geq c > 0$

(b) Il existent des sous suites (noté encore par l'indice n) et deux fonctions ϕ et α, et une suite de points x_n dans $\mathbb{R}^3$ tel que $\tilde{\phi}_n(x) \equiv \phi_n(x - x_n) \rightharpoonup \phi(x) \neq 0$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^3)$, $\tilde{\alpha}_n(x) \equiv \alpha_n(x - x_n) \rightharpoonup \alpha(x) \neq 0$ faiblement dans $L^p(\mathbb{R}^3)$. En plus

$$\sigma \cdot (p - \alpha)\phi = 0 \tag{3.14}$$

(c) Si la suite originelle a la propriété que ϕ_n ne converge pas faiblement à zéro dans $H^1(\mathbb{R}^3)$, l'affirmation dans (b) reste vraie pour $x_n \equiv 0$.

Pour la preuve de ce théorème on a besoins du lemme suivant.

Lemme 3.4 ([16]). *Soit $1 < p < \infty$ et $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ une suite de fonctions uniformément bornées dans $W^{1,p}(\mathbb{R}^d)$ avec la propriété que la mesure de Lebesgue de $\{x : |f_n(x)| > \epsilon\} > C$ pour des constantes C et $\epsilon > 0$ fixées. Alors il existe une suite de translations $\{\tau_n\}_{n=1}^{\infty}$ de $\mathbb{R}^d$, $\tau_n y = y + x_n$, $F_n(y) \equiv f_n(\tau_n y) = f_n(y+x_n)$, tel que, pour un sous suite, $F_n \rightharpoonup F$ faiblement dans $W^{1,p}(\mathbb{R}^d)$ et $F \neq 0$.*

On peut maintenant montrer le théorème 3.1.

Preuve du Théorème 3.1. Commençons par établir quelques résultats utiles dans la suite (sauf mention explicite les espaces de Sobolev et les L^p sont sur $\mathbb{R}^3$).
Par (i) et la définition de λ_n on a que ϕ_n est uniformément bornée dans H^1: $\|\phi_n\|_{H^1} \leq \xi_2$. De même par (iii) α_n est uniformément bornée dans L^p: $\|\alpha_n\|_p \leq D$. On a aussi $C_n \geq 1 - \|\alpha_n\|_p\|\phi_n\|_q$ avec $q = \frac{2p}{p-2}$ $(2 < q < 6)$, en effet

$$\|\sigma \cdot (p - \alpha_n)\phi_n\|_2 = \lambda_n\|\sigma \cdot (p - A_n)\psi_n\|_2 \leq C_n \xrightarrow{n\to\infty} 0 \tag{3.15}$$

où l'inégalité suit de (iv); donc, par l'inégalité du triangle inverse

$$C_n \geq \|(\sigma \cdot p)\phi_n\|_2 - \|(\sigma \cdot \alpha_n)\phi_n\|_2$$

et par les propriétés des matrices de Pauli $(\sigma{\cdot}\alpha)^2 = \alpha^2$ et $\|(\sigma{\cdot}p)\phi\|_2 = \|\nabla\phi\|_2$[5] on a $C_n \geq \underbrace{\|\nabla\phi_n\|_2}_{=1} - \|\alpha_n\phi_n\|_2$, on conclut avec l'inégalité d'Hölder.

On va prouver (a). Par l'inégalité de Sobolev-Rellich [7] on a $\|\phi_n\|_q \leq C_q\|\phi_n\|_{H^1}$ pour $q \in [1, 6]$, d'où $\|\phi_n\|_q \leq d_q$ ce qui permet d'écrire $\|\alpha_n\|_p \geq \frac{1-C_n}{d_q}$ et donc

$$\begin{aligned}
\liminf_{n\to\infty} \|\alpha_n\|_p &= \lim_{n\to\infty}\left(\inf_{k\geq n}\|\alpha_k\|_p\right) \\
&\geq \lim_{n\to\infty}\left(\inf_{k\geq n}\frac{1-C_k}{d_q}\right) = \frac{1}{d_q} > 0
\end{aligned}$$

D'autre parte on a aussi $\liminf_{n\to\infty}\|\phi_n\|_p > 0$ car $\|\alpha_n\|_p \leq D$.

Pour la preuve de (b) on va utiliser le lemme 3.4 et pour pouvoir utiliser ceci le lemme A.2. Comme $\|\phi_n\|_2 \leq d_2$ et $\|\phi_n\|_6 \leq d_6$ (Sobolev-Rellich) et que il existe $2 < q < 6$ tel que $\|\phi_n\|_q \geq C_q > 0$ le lemme A.2 s'applique et comme on a aussi que ϕ_n est uniformément bornée dans H^1 aussi le lemme 3.4 s'applique.
Par ce dernier il existe une suite de point $x_n \in \mathbb{R}^3$ eu une sous suite $\tilde{\phi}_n(x) \equiv \phi_n(x - x_n)$ tel que $\tilde{\phi}_n \rightharpoonup \phi \neq 0$ dans H^1. D'autre part comme α_n est uniformément bornée dans L^p il existe $\alpha \in L^p$ tel que $\tilde{\alpha}_n \rightharpoonup \alpha$ dans L^p.
On va montrer que $\tilde{\alpha}_n\tilde{\phi}_n \rightharpoonup \alpha\phi$ en L^2 pour chaque composante. Pour cela posons $\tilde{\alpha}_n \equiv a_n$, $\tilde{\phi}_n \equiv f_n$ et $\tilde{\alpha} \equiv a$, $\tilde{\phi} \equiv f$.

[5]On passe en transformée de Fourier (elle est bien définie car $\nabla\phi \in L^2$) en utilisant l'identité de Placherel, ensuite on utilise la propriété utilisé pour α

Par le choix de p et q on a que $\|a_n f_n\|_2 \leq \|a_n\|_p \|f_n\|_q < \infty$, il faut donc montrer que pour tout compact $K \subset \mathbb{R}^3$

$$\lim_{n\to\infty}(a_n f_n, \psi) = (af, \psi) \qquad \forall\, \psi \in L^2(K) \tag{3.16}$$

la convergence est clairement prise dans $\mathbb{C}$.
Soit $I = (a_n f_n - af, \psi)$, alors

$$I = \underbrace{\int_K (a_n - a) f\psi\, dy}_{(1)} + \underbrace{\int_K (f_n - f) a_n \psi\, dy}_{(2)}$$

or
(1): $(a_n - a) \in L^p(K)$ et $f\psi \in L^{p'}(K)$ car $\|f\psi\|_{p'} \leq \|f\|_q \|\psi\|_2 < \infty$ pour le choix de p et q, on a donc

$$\int_K (a_n - a) f\psi\, dy \longrightarrow 0 \quad \text{lorsque} \quad n \to \infty$$

car par hypothèse $a_n \rightharpoonup a$ dans $L^p(K)$.
(2): par le choix de p et q on a

$$\begin{aligned} \left| \int_K (f_n - f) a_n \psi\, dy \right| &\leq \|(f_n - f) a_n \psi\|_1 \\ &\leq \|f_n - f\|_q \|a_n\|_p \|\psi\|_2 < \infty \end{aligned}$$

et $\|f_n - f\|_q \to 0$ lorsque $n \to \infty$ car, par le théorème de Rellich-Kondrachov [7], f_n converge fortement dans $L^q(K)$. Ceci montre (3.16).
Il faut maintenant montrer que

$$g_n \equiv \sigma \cdot (p - a_n) f_n \rightharpoonup \sigma \cdot (p - a) f \equiv g$$

dans L^2. Or on vient de montrer que $a_n f_n \rightharpoonup af$ dans L^2 et comme $f_n \rightharpoonup f$ dans H^1 on a $\nabla f_n \rightharpoonup \nabla f$ dans L^2 ce qui “montre” que $pf_n \rightharpoonup pf$ dans L^2. Il s'en suit[6] que $g_n \rightharpoonup g$ dans L^2.
Montrons que $g = 0$ avec $a \neq 0$. (3.15) montre que $\|g_n\|_2 \to 0$ lorsque $n \to \infty$, par la semi-continuité inférieure faible de la norme on a

$$\|g\|_2 \leq \liminf_{n\to\infty} \|g_n\|_2 = 0$$

d'où $\|g\|_2 = 0$ et donc $g = 0$, on a donc

$$\sigma \cdot (p - \alpha)\phi = 0$$

[6]Remarquons que l'on a montré la convergence faible pour une fonction à une composante, pour un spineur on vérifie la convergence composante par composante

Or $\alpha \neq 0$ sinon on a $(\sigma \cdot p)\phi = 0$ avec $\phi \neq 0$ ce qui implique $\phi = cte \neq 0$ qui est impossible car $\phi \in H^1$.

Pour prouver (c) il suffit de trouver $\phi_n \rightharpoonup \phi \neq 0$ dans H^1.
Comme H^1 est un Banach réflexif et ϕ_n est uniformément bornée dans H^1, il existe une sous suite (de ϕ_n) $\phi_{n_j} \rightharpoonup \phi$ dans H^1 [23], qui par hypothèse n'est pas zéro.
Le reste de la preuve est comme pour (b). $\square$

3.4.2 La formule pour z_c

Pour déterminer la formule de z_c on a besoin du théorème suivant.

Théorème 3.2. *Soit $(\psi_n, A_n) \in \mathcal{C}$ deux suites qui satisfont pour tout n*

$$E_n(z) = \mathcal{E}(\psi_n, A_n) < 0 \qquad \limsup_{n\to\infty}(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) = \infty$$

alors les conclusion (a) et (c) du théorème 3.1 sont valables pour ces suites, avec $p = 6$, $s = \frac{1}{2}$, $D = \frac{1}{S}\left(\frac{z}{\epsilon}\right)^{1/2}$ et $C_n = z^{1/2}\|\nabla\psi_n\|_2^{-1/2}$. En plus, pour la sous suite donnée en (c) on a

$$(\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) \longrightarrow (\phi, |x|^{-1}\phi) \neq 0 \tag{3.17}$$

Preuve. Il s'agit ici de vérifier les hypothèses du théorème 3.1. Mais rappelons l'expression de E_n (on écrit E_n pour $E_n(z)$)

$$E_n = \mathcal{E}(\psi_n, A_n) = \|\sigma\cdot(p - A_n)\psi_n\|_2^2 - z(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) + \epsilon\int_{\mathbb{R}^3} B_n^2(x)\,dx \tag{3.18}$$

(i) est clair car $\psi_n \in \mathcal{C}$.
Pour (ii) utiliser l'inégalité $(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) \leq \|\nabla\psi_n\|_2\|\psi_n\|_2$ et le fait que $(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n)$ diverge.
Pour (iii) et (iv) remarquons que, pour le choix de $E_n < 0\,(\forall\, n)$, de (3.18) on a

$$\begin{aligned} \|\sigma\cdot(p - A_n)\psi_n\|_2^2 + \epsilon\int_{\mathbb{R}^3} B_n^2(x)\,dx &\leq z(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) \\ &\leq z\|\nabla\psi_n\|_2 \end{aligned} \tag{3.19}$$

donc par le choix de C_n on a (iv).
Pour (iii) de (3.19) on a $\|B_n\|_2^2 \leq \frac{z}{\epsilon}\|\nabla\psi_n\|_2$ et par le théorème B.1 de l'appendice B et l'inégalité de Sobolev (lemme 2.1, avec $K = S$) on a

$\|A_n\|_6 \leq \frac{1}{S}\left(\frac{z}{\epsilon}\right)^{1/2}\|\nabla\psi_n\|_2^{1/2}$. Ceci prouve que (a) et (b) sont valables.
Pour (c) supposons $\phi_n \rightharpoonup 0$ dans H^1 alors $b_n \equiv (\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) \to 0$, $n \to \infty$. Pour voir ceci écrivons $b_n = b_n^+ + b_n^-$ avec $b_n^- = (\phi_n, |x|^{-1}\chi_R\phi_n)$, où χ_R est la fonction caractéristique de la boule fermée $B_R \equiv B(0,R)$. On a alors

$$\left|b_n^-\right| \leq \| |\phi_n|^2|x|^{-1}\|_1 \leq \underbrace{\||\phi_n|^2\|_2}_{=\|\phi_n\|_4^{1/2}} \underbrace{\||x|^{-1}\|_2}_{\in L^2(B_R)} \longrightarrow 0 \qquad \text{pour} \quad n \to \infty$$

car par le théorème de Rellich-Kondrachov $\phi_n \to 0$ dans $L^4(B_R)$, pour R fixé. D'autre part on a $b_n^+ \leq \frac{1}{R}$ et dans la limite $R \to \infty$ il s'annule.
Faisons maintenant le changement d'échelle "habituel" ($\beta_n(x) = \lambda_n^2 B_n(\lambda_n x)$), (3.18) s'écrit

$$\lambda_n E_n = \lambda_n^{-1}\|\sigma \cdot (p - \alpha_n)\phi_n\|_2^2 - z b_n + \epsilon\|\beta_n\|_2^2 \tag{3.20}$$

et, comme $E_n < 0$ lorsque $n \to \infty$ si $b_n \to 0$ il faut que $\beta_n \to 0$ dans L^2 ce qui implique (par Sobolev) que $\alpha_n \to 0$ dans L^6 mais ceci contredit la conclusion (a) du théorème 3.1, d'où $\phi_n \not\rightharpoonup 0$ dans H^1 et donc $b_n \not\to 0$. Ceci conclut la preuve. $\square$

Remarque On peut toujours choisir $E_n(z) < 0$, car il suffit de considérer le problème hydrogénoïde avec $A_n \equiv 0$ et ψ_n l'état fondamental de l'atome hydrogénoïde bien connu.

Définition 3.3. *Le z critique z_c est défini comme le z pour le quel*

$$\begin{array}{lcl} E(z < z_c) & & \textit{fini} \\ E(z > z_c) & = & -\infty \end{array} \tag{3.21}$$

On définit aussi

$$\hat{z} = \inf_{\mathcal{F}} \frac{\epsilon\|B\|_2^2}{(\psi, |x|^{-1}\psi)} \tag{3.22}$$

Théorème 3.3. *On a*

$$z_c = \hat{z}$$

Preuve. Supposons que pour un z donné $E_n \longrightarrow -\infty$, les hypothèses du théorème 3.2 sont satisfaites, car pour $E_n \longrightarrow -\infty$ on doit avoir $\lim_{n\to\infty}(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) = \infty$. (Aussi ici on écrit E_n pour $E_n(z)$).
On a donc $\phi_n \rightharpoonup \phi \neq 0$ dans H^1, $\beta_n \rightharpoonup \beta$ dans L^2 (car β_n est uniformément bornée dans L^2) et $(\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) \longrightarrow (\phi, |x|^{-1}\phi) \neq 0$.

Or $\|\beta\|_2 \leq \liminf_{n\to\infty} \|\beta_n\|_2$ et $\|\phi\|_2 \leq \liminf_{n\to\infty} \|\phi_n\|_2 = 1$. Donc par (3.20)

$$\begin{aligned} \lambda_n E_n &= \lambda_n^{-1} \|\sigma \cdot (p - \alpha_n)\phi_n\|_2^2 - z(\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) + \epsilon \|\beta_n\|_2^2 \\ &\geq \epsilon \|\beta_n\|_2^2 - z(\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) \end{aligned}$$

et comme $\liminf_{n\to\infty}(\phi_n, |x|^{-1}\phi_n) = (\phi, |x|^{-1}\phi)$ on a

$$0 \geq \liminf_{n\to\infty} \lambda_n E_n \geq \epsilon\|\beta\|_2^2 - z(\phi, |x|^{-1}\phi)$$

Comme $\|\phi\|_2 \leq 1$ posons $\hat{\phi} = \frac{\phi}{\|\phi\|_2}$, on a alors

$$\begin{aligned} z &\geq \frac{\epsilon\|\beta\|_2^2}{(\phi, |x|^{-1}\phi)} \geq \frac{\epsilon\|\beta\|_2^2}{(\hat{\phi}, |x|^{-1}\hat{\phi})} \\ &\geq \inf_{(\alpha,\hat{\phi})} \frac{\epsilon\|\beta\|_2^2}{(\hat{\phi}, |x|^{-1}\hat{\phi})} = \hat{z} \end{aligned}$$

car $\|\beta\|_2^2 = \lambda\|B\|_2^2$ et $(\hat{\phi}, |x|^{-1}\hat{\phi}) = \lambda(\psi, |x|^{-1}\psi)$. On a donc $z \geq \hat{z}$ qui implique $z_c \geq \hat{z}$.

Supposons maintenant que $z_c > \hat{z}$ alors il existe $(\psi, A) \in \mathcal{F}$ tel que

$$\frac{\epsilon\|B\|_2^2}{(\psi, |x|^{-1}\psi)} < \tilde{z} \equiv \hat{z} + \tfrac{1}{2}\underbrace{(z_c - \hat{z})}_{>0}$$

posons alors $\psi_n(x) = n^{3/2}\psi(nx)$ et $A_n(x) = nA(nx)$ alors pour $\tilde{z}$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\psi_n, A_n) &= \epsilon\|B_n\|_2^2 - \tilde{z}(\psi_n, |x|^{-1}\psi_n) \\ &= n\left\{\epsilon\|B\|_2^2 - \tilde{z}(\psi, |x|^{-1}\psi)\right\} \\ &= n(\psi, |x|^{-1}\psi)\underbrace{\left\{\frac{\epsilon\|B\|_2^2}{(\psi, |x|^{-1}\psi)} - \tilde{z}\right\}}_{<0} \end{aligned}$$

et lorsque $n \to \infty$ $\mathcal{E}(\psi_n, A_n) \longrightarrow -\infty$ d'où $E(z) = -\infty$, ce qui est une contradiction car $\tilde{z} < z_c$; donc $z_c \not> \hat{z}$ ce qui implique $\hat{z} = z_c$ □

Remarques

- On a donc prouvé que

$$\begin{aligned} E(z > z_c) &= -\infty \\ E(z < z_c) &> -\infty. \end{aligned}$$

- Le fait que $z_c < \infty$ est du au fait que $(\phi, |x|^{-1}\phi) \neq 0$ ($\|B\|_2^2 < \infty$ car $B \in L^2$) ceci provient du fait que $\phi_n \rightharpoonup \phi \neq 0$ dans H^1 et donc qu'il existe $\phi \neq 0$ tel que le terme d'énergie cinétique soit nul, c'est-à-dire que $\sigma \cdot (p - \alpha)\phi = 0$.

On se pose maintenant la question s'il existe, pour $z < z_c$, un minimum pour la fonctionnelle $\mathcal{E}$ (3.11) pour $(\psi, A) \in \mathcal{C}$ (ceci revient à dire que l'infimum dans (3.12) est un minimum), d'autre part on voudrait savoir s'il existe $(\psi, A) \in \mathcal{F}$ tel que l'infimum dans (3.22) soit un minimum. On a le théorème suivant.

Théorème 3.4 ([9]). *On a:*

(a) lorsque $z < z_c$ il existe $(\psi, A) \in \mathcal{C}$ tel que

$$\mathcal{E}(\psi, A) = E(z) = \inf\{\mathcal{E}(\psi', A') : (\psi', A') \in \mathcal{C}\} \tag{3.23}$$

(b) il existe $(\psi, A) \in \mathcal{F}$ tel que

$$\hat{z} = z_c \frac{\epsilon \|B\|_2^2}{(\psi, |x|^{-1}\psi)} \tag{3.24}$$

3.5 Cas d'un champ B constant en direction

3.5.1 Introduction

Dans cette section et la suivante on va considérer des champs magnétiques particuliers, on commence par le cas d'un champ B constant en direction (mais pas forcement en module). Ensuite on regarde le cas d'un champ B qui n'est pas constant ni en direction ni en module.

3.5.2 Position du problème

Soit $0 \in \mathbb{R}^3$ la position du noyau, B_R la boule $B(0, R)$. Pour le champ magnétique posons

$$B(x) = \begin{cases} (0, 0, b(x)) & \text{si } x \in B_R \\ \text{arbitraire} & \text{si } x \notin B_R \end{cases} \tag{3.25}$$

avec $b(x)$ une fonction arbitraire[7]. Soit $\psi(x)$ le spineur de l'électron, on définit deux fonctions η_1, η_2 de classe C^∞ tel que

$$\eta_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in B_{R/2} \\ 0 & \text{si } x \notin B_R \end{cases} \qquad \eta_2(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in B_{R/2} \\ 1 & \text{si } x \notin B_R \end{cases} \tag{3.26}$$

de telle sorte que $\eta_1^2(x) + \eta_2^2(x) = 1$.
On définit alors $\psi_i(x) = \eta_i(x)\psi(x)$, $i = 1, 2$ (on a alors $\psi^2(x) = \psi_1^2(x) + \psi_2^2(x)$).
Dans ce qui suit on va montrer que l'énergie $E(z)$ est finie si $R > 0$.

3.5.3 Borne inférieure de l'énergie

Soit

$$\begin{aligned} T_3(\psi_1, A) &\equiv \|(p_3 - A_3)\psi_1\|_2^2 \geq \|p_3|\psi_1|\|_2^2 \equiv T_3(\psi_1) & (3.27) \\ T_\perp(\psi_1, A) &\equiv \|(p_\perp - A_\perp)\psi_1\|_2^2 \geq \|p_\perp|\psi_1|\|_2^2 \equiv T_\perp(\psi_1) & (3.28) \end{aligned}$$

où: $Y_\perp = (Y_1, Y_2)$ et les inégalités suivent de l'inégalité diamagnétique (voir la preuve du lemme 3.1). Or

$$\begin{aligned} \|\sigma \cdot (p - A)\psi_1\|_2^2 &= T_3(\psi_1, A) + T_\perp(\psi_1, A) - \int_{B_R} b(x)\langle\psi_1, \sigma_3\psi_1\rangle(x)\, dx \\ &= T_3(\psi_1, A) + U_\perp(\psi_1, A) \\ &= T_3(\psi_1, A) + \|\sigma_\perp \cdot (p_\perp - A_\perp)\psi_1\|_2^2 \end{aligned}$$

ayant posé: $U_\perp(\psi_1, A) = T_\perp(\psi_1, A) - \int_{B_R} b(x)\langle\psi_1, \sigma_3\psi_1\rangle(x)\, dx$. Soit maintenant

$$\mathcal{E}'(\psi_1, A) = T_3(\psi_1) + U_\perp(\psi_1, A) + \epsilon\|b\|_2^2 - z(\psi_1, |x|^{-1}\chi_R\psi_1) \tag{3.29}$$

χ_R étant la fonction caractéristique de la boule B_R; alors on peut minorer la fonctionnelle (3.11)

$$\mathcal{E}(\psi, A) = \underbrace{\|\sigma \cdot (p - A)\,\psi\|_2^2}_{(1)} + \underbrace{\epsilon\|B\|_2^2}_{(2)} - \underbrace{z(\psi, |x|^{-1}\psi)}_{(3)}$$

comme suit.
(1): par l'égalité (avec $f = (\nabla\eta_1)^2 + (\nabla\eta_2)^2$)

$$\|\sigma \cdot (p - A)\,\psi_1\|_2^2 + \|\sigma \cdot (p - A)\,\psi_2\|_2^2 = (\psi, f\psi) + \|\sigma \cdot (p - A)\,\psi\|_2^2$$

[7] On demande en tout cas que b soit de classe C^1

et le fait que l'on peut choisir η_i $(i = 1, 2)$ tel que $f(x) \le \frac{d}{R^2}$, d une constante fixé[8] on peut écrire

$$\begin{aligned}(1) \quad &= \underbrace{\|\sigma \cdot (p - A)\, \psi_1\|_2^2}_{\ge T_3(\psi_1) + U_\perp(\psi_1, A)} + \underbrace{\|\sigma \cdot (p - A)\, \psi_2\|_2^2}_{>0} - \underbrace{(\psi, f\psi)}_{\le \frac{d}{R^2}} \\ &\ge T_3(\psi_1) + U_\perp(\psi_1, A) - \frac{d}{R^2}\end{aligned}$$

(2): clairement $\|B\|_2^2 \ge \|b\|_2^2$
(3): on a

$$\begin{aligned}(\psi, |x|^{-1}\psi) &= (\psi_1, |x|^{-1}\psi_1) + \underbrace{(\psi_2, |x|^{-1}\psi_2)}_{\le \frac{2}{R}} \\ &\le (\psi_1, |x|^{-1}\chi_R\psi_1) + \frac{2}{R}\end{aligned}$$

et donc

$$\mathcal{E}(\psi, A) \ge \mathcal{E}'(\psi_1, A) - \frac{d}{R^2} - \frac{2z}{R} \tag{3.30}$$

Soit alors $E'(z) = \inf_{(\psi_1, A) \in \mathcal{C}} \mathcal{E}'(\psi_1, A)$, on a

$$E(z) \ge E'(z) - \frac{d}{R^2} - \frac{2z}{R}$$

Il faut maintenant analyser le terme $E'(z)$, pour cela posons pour chaque intégrale $\int dx = \int dx_3 \int dx_\perp$ et considérons les fonctions qui interviennent dans (3.29) comme des fonctions de $x_\perp$ paramétré par x_3, on écrit alors

$$\mathcal{E}'(\psi_1, A) = T_3(\psi_1) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}''(\psi_1, A)\, dx_3 \tag{3.31}$$

où:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}''(\psi_1, A) = &\int_{\mathcal{D}(x_3)} |\sigma_\perp \cdot (p_\perp - A_\perp(x))\psi_1(x)|^2\, dx_\perp + \epsilon \int_{\mathcal{D}(x_3)} b^2(x)\, dx_\perp \\ &- z \int_{\mathcal{D}(x_3)} \frac{\langle \psi_1, \psi_1 \rangle(x)}{(x_\perp^2 + x_3^2)^{1/2}}\, dx_\perp\end{aligned} \tag{3.32}$$

[8]Pour voir ceci posons $\eta_1(x) = \eta\left(\frac{x}{R}\right)$ et remarquons que $\nabla\eta_1(x) = \frac{1}{R} \underbrace{\nabla\eta\left(\frac{x}{R}\right)}_{=A}$ avec A fixé, de même pour $\eta_2(x)$

et $\mathcal{D}(x_3) = \{x_\perp : x_\perp^2 + x_3^2 = R\}$.
Pour étudier (3.32) posons, pour tout x_3, $t(x_3)$ tel que $0 \leq t(x_3) \leq 1$ et remplaçons le premier terme de $\mathcal{E}''(\psi_1, A)$ par $t(x_3)$ fois ce terme, utilisons aussi le fait que

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{D}(x_3)} |\sigma_\perp \cdot (p_\perp - A_\perp(x))\psi_1(x)|^2 \, dx_\perp &\geq \int_{\mathcal{D}(x_3)} |(p_\perp - A_\perp(x))\psi_1(x)|^2 \, dx_\perp \\ &\quad - \int_{\mathcal{D}(x_3)} |b(x)||\langle\psi_1, \sigma_3\psi_1\rangle(x)| \, dx_\perp \\ &\geq T_\perp^{(\perp)}(\psi_1) - \int_{\mathcal{D}(x_3)} |b(x)|\langle\psi_1, \psi_1\rangle \, dx_\perp\end{aligned}$$

où $T_\perp^{(\perp)}(\psi_1) = \int_{\mathcal{D}(x_3)} (\nabla_\perp|\psi_1|(x))^2 \, dx_\perp$ et l'inégalité suit de la définition B.2. Minimisons alors la partie de $\mathcal{E}''(\psi_1, A)$ qui dépend explicitement de b par rapport à ce paramètre $\left(b_{min}(x) = \frac{t(x_3)\langle\psi_1,\psi_1\rangle(x)}{2\epsilon}\right)$; maximisons ensuite la partie de la fonctionnelle qui dépend de $t(x_3)$ (avec le b_{min} trouvé) par rapport à $t(x_3)$, la borne inférieure pour les deux premiers termes vaut

$$\min\left\{\frac{(J_\perp)^2}{4\epsilon}; \epsilon\left(\frac{T_\perp^{(\perp)}}{J_\perp}\right)^2\right\} \tag{3.33}$$

où le premier cas correspond à la situation $t_{max}(x_3) > 1$ et l'on pose donc $t_{max}(x_3) = 1$, le deuxième provient du cas $t_{max}(x_3) \leq 1$. On a posé $(J_\perp)^2 = \int_{\mathcal{D}(x_3)} \langle\psi_1, \psi_1\rangle^2(x) \, dx_\perp$.
Pour le dernier terme de $\mathcal{E}''(\psi_1, A)$ notons que par Cauchy-Schwarz

$$-z \int_{\mathcal{D}(x_3)} \frac{\langle\psi_1, \psi_1\rangle(x)}{(x_\perp^2 + x_3^2)^{1/2}} \, dx_\perp \geq -zJ_\perp W(x_3)$$

avec

$$W^2(x_3) = \int_{\mathcal{D}(x_3)} \left(x_\perp^2 + x_3^2\right)^{-1} \, dx_\perp = \begin{cases} 2\pi \ln(R/|x_3|) & \text{si } R < |x_3| \\ 0 & \text{si } R \geq |x_3| \end{cases} \tag{3.34}$$

or, en utilisant l'inégalité de Sobolev dans $\mathbb{R}^2$,

$$T_\perp^{(\perp)} \geq \frac{S(J_\perp)^2}{g^2(x_3)} \qquad \text{avec} \quad g^2(x_3) = \int_{\mathcal{D}(x_3)} \langle\psi_1, \psi_1\rangle(x) \, dx_\perp$$

et donc

$$\mathcal{E}''(\psi_1, A) \geq (J_\perp)^2 \min\left\{(4\epsilon)^{-1}; \frac{\epsilon S^2}{g^4(x_3)}\right\} - zJ_\perp W(x_3) \tag{3.35}$$

$J_\perp$ étant inconnu on minimise (3.35) par rapport à $J_\perp$, on trouve

$$\mathcal{E}''(\psi_1, A) \geq -\frac{1}{4} z^2 W^2(x_3) \max\left\{4\epsilon; \frac{g^4(x_3)}{\epsilon S^2}\right\} \tag{3.36}$$

Il faut maintenant intégrer (3.36) sur x_3, on a deux cas à traiter, selon quel des deux valeurs dans $\{\dots\}$ est le maximum. Si le maximum est 4ϵ alors

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}(x_3)} rhs(3.36)\, dx_3 &= \int_{-R}^{R} rhs(3.36)\, dx_3 \\ &= -4\pi\epsilon z^2 R \end{aligned}$$

et on peut écrite $\mathcal{E}'(\psi_1, A) \geq -4\pi\epsilon z^2 R$.
Si par contre le maximum est l'autre on procède ainsi, on peut écrire [9] $T_3(\psi_1) \geq \|g'\|_2^2$ et

$$g^4(x_3) \leq \|g\|_2^2 \|g'\|_2^2 \leq T_3(\psi_1)$$

et donc dans ce cas

$$\mathcal{E}'(\psi_1, A) \geq T_3(\psi_1) \underbrace{\left(1 - \frac{\pi R z^2}{\epsilon S^2}\right)}_{K}$$

Pour se libérer de l'inconnue $T_3(\psi_1)$ posons R_0 le rayon original pour le quel le champ B est de la forme (3.25), si $K \geq 0$ posons $R = R_0$ si par contre $K < 0$ posons $R = \frac{\epsilon S^2}{\pi z^2} < R_0$ et avec ce choix de R le terme K est toujours non négatif, donc la plus faible valeur de $\mathcal{E}'(\psi_1, A)$ est $-4\pi\epsilon z^2 R$.
On a donc prouvé la proposition suivante:

Proposition 3.1. *Dans le cadre des conditions du paragraphe 3.5.2 on a*

$$E(z) \geq -4\pi\epsilon z^2 R - \frac{d}{R^2} - \frac{2z}{R} \tag{3.37}$$

avec

$$R = \min\left\{R_0; \frac{\epsilon S^2}{\pi z^2}\right\} \tag{3.38}$$

Remarque On voit que $E(z) > -\infty$ si $R \neq 0$, c'est-à-dire s'il existe une région autour du noyau où le champ B est de la forme $B(x) = b(x)(0, 0, 1)$, c'est-à-dire il est homogène en direction, pour un tel champ on a donc toujours la stabilité.

3.6 Cas d'un champ B plus général

Dans cette dernière section on va considérer un champ magnétique plus général de celui de la section précédente, on va montrer, sur un exemple d'un spineur ψ particulier, que il existe un z_c au dessus du quel le système perd la stabilité (de première espèce).

3.6.1 Préliminaires

La proposition suivante va nous permettre de de trouver $A(x)$.

Proposition 3.2. *Soit le problème*

$$\sigma \cdot p\psi(x) = \lambda(x)\psi(x) \qquad \lambda(x) \in \mathbb{R} \tag{3.39}$$

supposons qu'il y ait une solution avec $\langle\psi, \psi\rangle(x) \neq 0$*, alors en posant*

$$A(x) = \frac{\lambda(x)\langle\psi, \sigma\psi\rangle(x)}{\langle\psi, \psi\rangle(x)} \tag{3.40}$$

on a une solution de $\sigma \cdot (p - A)\,\psi = 0$

Preuve. Soit

$$Q(x) = \sigma \cdot \frac{\langle\psi, \sigma\psi\rangle(x)}{\langle\psi, \psi\rangle(x)}$$

en utilisant la relation $\langle\psi, \sigma\psi\rangle\langle\psi, \sigma\psi\rangle = \langle\psi, \psi\rangle^2$ (voir définition B.2) on trouve que $Q\psi = \psi$ et donc

$$\begin{aligned} \sigma \cdot A(x)\psi(x) &= \sigma \cdot \frac{\lambda(x)\langle\psi, \sigma\psi\rangle(x)}{\langle\psi, \psi\rangle(x)}\psi(x) \\ &= \lambda(x)\psi(x) \end{aligned}$$

□

Remarque Le champ $A(x)$ donné par la proposition 3.2 n'est pas forcement de divergence nulle, il faudra trouver un changement de jauge approprié (ajouter un $\nabla\chi$).

3.6.2 Non stabilité sur un exemple [17]

Prenons

$$\psi(x) = \left(1 + x^2\right)^{-3/2} (1 + i\sigma \cdot x)\phi_0 \tag{3.41}$$

avec ϕ_0 un spineur arbitraire, mais normalisé. On montre facilement que

$$\sigma \cdot p\psi(x) = \underbrace{\frac{3}{1+x^2}}_{\lambda(x)} \psi(x)$$

donc par (3.40)

$$A(x) = 3(1+x^2)\langle\psi, \sigma\psi\rangle(x)$$

car $\langle\psi, \psi\rangle(x) = (1+x^2)^{-2}$, en posant $w = \langle\phi_0, \sigma\phi_0\rangle$ on a

$$\langle\psi, \sigma\psi\rangle = U = (1+x^2)^{-3} \left\{(1-x^2)w + 2(w\cdot x)x + 2w \times x\right\}$$

On vérifie que $\operatorname{div} A(x) = \frac{6(w\cdot x)}{(1+x^2)^2} \neq 0$, et que la transformation de jauge suivante donne $\operatorname{div} A' = 0$,

$$A' = A + \nabla\chi \qquad \psi' = e^{i\chi}\psi$$

où $-\Delta\chi(x) = \operatorname{div} A(x)$, d'où

$$\chi(x) = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x-y|}\frac{6(w\cdot x)}{(1+x^2)^2}\, dy = (w\cdot x)\frac{3}{r^3}(r - \arctan r)$$

avec $r = |x|$. En plus on vérifie que $A' \in L^6(\mathbb{R}^3)$, de même $\psi' \in H^1(\mathbb{R}^3)$ et $B \in L^2(\mathbb{R}^3)$, on a donc, après normalisation de ψ, deux fonctions $(\psi, A) \in \mathcal{F}$. On peut donc calculer z_c

$$z_c = \min_{(\psi,A)\in\mathcal{F}} \frac{\epsilon\int_{\mathbb{R}^3} B^2(x)\, dx}{(\psi, |x|^{-1}\psi)}$$

Après calculs on trouve

$$z_c \leq 9\pi^3\epsilon = \frac{9\pi^2}{8\alpha^2} < \infty \tag{3.42}$$

Remarque On voit sur cet exemple que il existe des $\psi \in \mathcal{F}$ tel que la valeur critique de z est finie.

Chapitre 4

Stabilité de la QED avec la matière non relativiste

4.1 Introduction

Dans ce chapitre on va étudier la stabilité de la matière[1] couplée au champ de radiation quantifié, où en d'autres mots, la *stabilité de l'électrodynamique quantique (QED) avec la matière non relativiste.*

4.1.1 Le modèle

La matière est supposé décrite comme au chapitre 1 avec l'introduction du champ éléctromagnétique quantifié.
On a N *électrons* non relativistes qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli (spin $\frac{1}{2}$, masse "nue" m, charge $-e$, facteur giromagnétique "nu" $g = 2$), k *noyaux* statiques (charge $e(z_1, \ldots, z_k)$) et un nombre arbitraire de *photons* (deux états possibles pour l'hélicité).

4.1.2 Les interactions

On se place dans la *jauge de Coulomb*, dans ce cas les électrons sont couplés aux degrés de liberté transvers du champ de radiation (le quantum de ce champ étant le photon), on va se placer dans le cadre du couplage minimal[2]. En plus on a naturellement les interactions de type coulombien électron-électron, électron-noyau, noyau-noyau.

[1] Elle est traitée comme un système quantique non relativiste

[2] Ceci revient à remplace la dérivé ordinaire avec la dérivé covariante

Remarquons que l'on n'a pas couplé le moment magnétique des noyaux au champ de radiation. En ajoutant ce couplage, pour obtenir la H-stabilité, il faudra régulariser cette interaction [8]. Cependant, pour des noyaux de taille beaucoup inférieure du rayon de Bohr, la contribution des énergies Zeeman[3] des noyaux, à celle de l'état fondamental, est beaucoup plus faible que les énergies atomiques, pourvu que l'on introduit un *cutoff ultraviolet* à l'énergie du champ de radiation.
Les photons d'énergie beaucoup plus grande que $E_a \propto -mc^2(Z\alpha)^2$ ne sont donc pas couplés aux électrons, car on va imposer un cutoff ultraviolet au potentiel vecteur.

4.2 Espace de Hilbert et hamiltonien

Unités Les unités utilisés ici sont: $\hbar = c = 1$, $\alpha \approx \frac{1}{137}$ étant la constante de structure fine.

L'espace de Hilbert des états purs du système de N électrons et un nombre arbitraire de photons est donné par

$$\mathcal{H} = \bigwedge_{i=1}^{N} \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{F}$$

où: $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3, dx) \otimes \mathbb{C}^2$ est l'espace de Hilbert d'un électron, et $\mathcal{F}$ l'espace de Fock sur $L^2(\mathbb{R}^3, dk) \otimes \mathbb{C}^2$ symétrisé.

L'hamiltonien qui génère la dynamique est donné par

$$H = H_{el} + \mathbb{I} \otimes H_{ph} \tag{4.1}$$

avec:

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot (-i\nabla_i + e\boldsymbol{A}^{(\Lambda)}(x_i)) \right]^2 + V_C \tag{4.2}$$

et

$$V_C = \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{\alpha}{|x_i - x_j|} + \sum_{1 \le i < j \le k} \frac{\alpha z_i z_j}{|R_i - R_j|} - \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} \frac{\alpha z_j}{|x_i - R_j|} \tag{4.3}$$

[3]Couplage spin-champ

On ayant écrit $\sigma_\beta^{(i)}$ pour $\mathbb{I}\otimes\ldots\otimes\mathbb{I}\otimes\sigma_\beta\otimes\mathbb{I}\otimes\ldots\otimes\mathbb{I}$ défini sur $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, où σ_1, σ_2 et σ_3 sont les trois matrices de Pauli et le facteur σ_β se trouve dans la $i^{ème}$ position. $-i\nabla_i$ est l'opérateur impulsion (en représentation de configuration) de la particule i, x_i sa position et R_j celle du noyau j.
Le potentiel vecteur quantifié $\boldsymbol{A}(x)$, dans la jauge de Coulomb, est donné par

$$\boldsymbol{A}(x) = \boldsymbol{A}_-(x) + \boldsymbol{A}_+(x) \qquad \boldsymbol{A}_+(x) = (\boldsymbol{A}_-(x))^+$$

où:

$$\boldsymbol{A}_-(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} dk\, \frac{1}{\sqrt{2|k|}}\sum_{\lambda=\pm} a_\lambda(k)e_\lambda(k)e^{i(k,x)} \tag{4.4}$$

Les vecteurs $e_\pm(k)$ et $\hat{k} = \frac{k}{|k|}$ forment une base orthonormale de $\mathbb{R}^3\otimes\mathbb{C}$, les opérateurs $a_\lambda^+(k)$ et $a_\lambda(k)$ sont les opérateurs de création et annihilation sur $\mathcal{F}$ et satisfont les règles canoniques de commutation

$$\begin{aligned} [a_\lambda^\#(k), a_{\lambda'}^\#(k')] &= 0 \\ [a_\lambda(k), a_{\lambda'}^+(k')] &= \delta_{\lambda\lambda'}\delta(k-k') \end{aligned}$$

ici $a_\lambda^\#(k) = a_\lambda^+(k)$ où $a_\lambda(k)$. Le vecteur $\Omega\in\mathcal{F}$ qui a la propriété

$$a_\lambda(k)\Omega = 0 \qquad \forall\; k\in\mathbb{R}^3, \lambda=\pm$$

est l'état du vide.

Soit $\Lambda(k)$ une fonction qui a les propriétés suivantes

$$|\Lambda(k)|\le 1 \qquad \mathrm{supp}\Lambda \subseteq \{k\in\mathbb{R}^3 : |k|\le\Lambda\}$$

pour une constante Λ (le cutoff ultraviolet)[4]. Le potentiel vecteur avec cutoff ultraviolet Λ est donné par

$$\boldsymbol{A}^{(\Lambda)}(x) = \boldsymbol{A}_-^{(\Lambda)}(x) + \boldsymbol{A}_+^{(\Lambda)}(x) \qquad \boldsymbol{A}_+^{(\Lambda)}(x) = \left(\boldsymbol{A}_-^{(\Lambda)}(x)\right)^+$$

où:

$$\boldsymbol{A}_-^{(\Lambda)}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} dk\, \Lambda(k)\frac{1}{\sqrt{2|k|}}\sum_{\lambda=\pm} a_\lambda(k)e_\lambda(k)e^{i(k,x)} \tag{4.5}$$

Enfin l'hamiltonien des photons sur $\mathcal{F}$ est donné par

$$H_{ph} = \sum_{\lambda=\pm}\int_{\mathbb{R}^3} dk\, |k| a_\lambda^+(k)a_\lambda(k) \tag{4.6}$$

[4]Exemple: $e^{-\left(\frac{2k}{\Lambda}\right)^4}$

4.3 La stabilité

On va donner que le résultat qui montre la H-stabilité, c'est-à-dire que l'énergie par particule (chargé) est borné uniformément en N et k.

Théorème 4.1 ([4]). *Il existe une constante positive sans dimension ϵ tel que*[5]

$$H \geq -C(Z+1)^2(N+k) \tag{4.7}$$

pourvu que $\alpha^2(Z+1) \leq \epsilon$ et $\alpha\Lambda^4 \leq C(Z+1)^4$, $Z \geq z_i$ pour tout $1 \leq i \leq k$.

[5]Dans ce théorème on utilise les unités de [4]

Annexe A

Quelques résultats utiles

Dans cet appendice on donne des résultats utiles pour quelques preuves qui se trouvent dans les chapitres 2 et 3.

Pour le chapitre 2

Pour la preuve du corollaire 2.1

Théorème A.1 ([12]). *Soit* $V(x) \leq 0$ *le potentiel de l'opérateur* $H = -\Delta + V(x)$ *sur* $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$*. Pour* $E < 0$ *soit* $N_E(V)$ *le nombre d'états propres avec énergie plus petite ou égale à* E*, alors*

$$N_E(V) \leq (4\pi)^{-1}(2|E|)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^3} \left| V(x) - \frac{E}{2} \right|_-^2 dx \tag{A.1}$$

où: $|f(x)|_- = |f(x)|$ *si* $f(x) \leq 0$ *et* $|f(x)|_- = 0$ *sinon.*

Pour le chapitre 3

Pour la preuve du lemme 3.1

Lemme A.1. *Soit* $H(A) = (p - A)^2 + V(x)$ *et* $H(0) = p^2 + V(x)$*, alors*

$$\left|(x|e^{-tH(A)}|y)\right| \leq (x|e^{-tH(0)}|y) \tag{A.2}$$

Preuve (esquisse). On utilise la représentation de Feynman-Kac de l'intégrale fonctionnelle, pour le lagrangien classique

$$\mathcal{L}_A(r, v) = \frac{1}{2}m|v|^2 - V(r) + ev \cdot A(r)$$

on a le “propagateur” suivant [19]

$$(x|e^{-tH(A)}|y) = \int_{x,t_0}^{y,t} d\mu(\omega) \exp\left[-\int_{t_0}^{t} V(\omega(s))\, ds\right] \exp\left[i \int_{\mathcal{C}} A(\omega) \cdot d\omega\right]$$

où $\mathcal{C}$ est la courbe $\{\omega(s), t_0 \leq s \leq t\}$, ω un chemin et $d\mu(\omega)$ la mesure de Wiener.
On voit donc que la présence du champ magnétique, traduit ici par le potentiel vecteur, se “manifeste” par un facteur de phase purement imaginaire.
En prenant la valeur absolue du “propagateur” il suit facilement (A.2). $\square$

Pour la preuve du théorème 3.1

Lemme A.2 ([9]). *Soit g une fonction mesurable dans un espace mesuré tel que pour $p < q < r$ fixés et pour des constates C_p, C_q, C_r strictementes positives,*

(i) $\|g\|_p^p \leq C_p$

(ii) $\|g\|_r^r \leq C_r$

(iii) $\|g\|_q^q \geq C_q > 0$

Alors pour un ϵ fixé, $f(\epsilon) \equiv \mathrm{mes}\{x : |g(x)| \geq \epsilon\} > C$,avec $C > 0$ dépendant de p, q, r, C_p, C_q, C_r, mais pas de g.

Annexe B

Préliminaires mathématiques pour le chapitre 3

Normes

Définition B.1. *Soit F un champ vectoriel, alors*

$$\begin{aligned} \|F\|_p &= \left\|(F \cdot F)^{1/2}\right\|_p \\ \|\nabla F\|_2 &= \left\|\left(\sum_{i,j} |\partial_i F_j|^2\right)^{1/2}\right\|_p \end{aligned}$$

avec $F \cdot F = \sum_i |F_i|^2$

Définition B.2. *Soit ψ un spineur, alors*

$$\begin{aligned} \|\psi\|_p &= \left\|\langle \psi, \psi \rangle^{1/2}\right\|_p \\ \|\nabla \psi\|_2 &= \left\|\left(\sum_{i,j} |\partial_i \psi_j|^2\right)^{1/2}\right\|_p \end{aligned}$$

avec $\langle \psi, \psi \rangle(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 = \left(\sum_i |\langle \psi, \sigma_i \psi \rangle(x)|^2\right)^{1/2} = \langle \psi, \sigma\psi \rangle(x)$.

Champs A et B

Le potentiel vecteur A qui donne le champ magnétique $B = \operatorname{rot} A$ n'est définit qu'à une transformation de jauge près, le principe de jauge implique les transformations suivantes

$$\begin{array}{ccc} \psi & \longrightarrow & e^{i\Phi}\psi \\ A & \longrightarrow & A + \nabla\Phi \end{array}$$

avec $\Phi \in C^2(\mathbb{R}^3)$. On choisit ici la *jauge le Coulomb* ($\operatorname{div} A = 0$).

On demande $B \in L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ pour que l'énergie du champ soit bien définie.

Théorème B.1 ([9]). *Si $B \in L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ avec $\operatorname{div} B = 0$ dans $\mathcal{D}'$, alors il existe un unique A tel que*

$$\operatorname{rot} A = B \qquad \operatorname{div} A = 0 \quad \textit{dans} \quad \mathcal{D}' \qquad A \in L^6(\mathbb{R}^3, dx)$$

avec $\mathcal{D}'$ l'espace des distributions.
En plus

$$\|B\|_2^2 = \|\nabla A\|_2^2 \geq S\|A\|_6^2$$

ce qui implique $\nabla A \in L^2(\mathbb{R}^3, dx)$.

Spineurs

On demande (clairement) que $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx; \mathbb{C}^2)$.
Le terme de Pauli de (3.4) (pris en valeur moyen) peut être vue comme une forme quadratique

$$Q(\psi) = \|\sigma \cdot (p - A)\, \psi\|_2^2$$

Théorème B.2 ([9]). *Soit $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx; \mathbb{C}^2)$, $A \in L^6(\mathbb{R}^3, dx)$, alors si $\|\sigma \cdot (p - A)\psi\|_2 < \infty$ on a $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$. Ceci entraîne que l'on a aussi $\nabla\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx; \mathbb{C}^2)$ et (par l'inégalité $(\psi, |x|^{-1}\psi) \leq \|\nabla\psi\|_2\|\psi\|_2$) $(\psi, |x|^{-1}\psi) < \infty$.*

Définition B.3. *Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert. L'*espace de Sobolev[1]*, $H^1(\Lambda)$, est l'ensemble des fonctions $f \in L^2(\Lambda)$ avec la dérivé (au ses des distributions) $\nabla f \in L^2(\Lambda)$. H^1 est un espace de Hilbert pour la norme*

$$\|\psi\|_{H^1} = \left(\|\psi\|_2^2 + \|\nabla\psi\|_2^2\right)^{1/2}$$

[1] Attention: En général on définit l'espace $W^{r,p}$ [7], ici on utilise $W^{1,2} \equiv H^1$

Annexe C

États à énergie cinétique zéro

Introduction

Dans cette appendice on étudie brièvement les états à énergie cinétique zéro pour l'opérateur

$$H(a) = [\sigma \cdot (p - a)]^2 \tag{C.1}$$

On montre que le nombre d'états propres de $H(a)$ avec valeur propre zéro est égale à la partie intégrale du flux magnétique.

Nombre d'états à énergie cinétique zéro

On a le théorème suivant.

Théorème C.1. *Soit $B \in C_0(\mathbb{R}^2)$ un champ vectoriel borné tel que, pour $a = (a_1, a_2)$, $B = da$. Soit $\{y\}$ le plus grand entier strictement plus petit de y, pour $y > 0$ et zéro pour $y = 0$, soit $\phi_0 = \int B(x)\,dx \geq 0$ le flux de B. Alors l'opérateur $H(a)$ possède exactement $\left\{\frac{\phi_0}{2\pi}\right\}$ états propres avec valeur propres zéro, tous avec $\sigma_3 = -1$.*

Preuve. Prenons un ϕ tel que $-\Delta\phi = B$,

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \ln(|x - x'|) B(x')\,dx'$$

alors $-\Delta\phi = B$ (car $\frac{1}{2\pi}\ln(|x - x'|)$ est la fonction de Green de $-\Delta$ en deux dimensions) et si on prend $a = \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}, -\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)$ on a $da = -\Delta\phi = B$.
Considérons alors les solutions de $[\sigma \cdot (p - a)]^2 \psi = 0$, comme $H(a)$ est

le carré d'un opérateur (formellement) auto-adjoint, cette équation est équivalente à $\sigma \cdot (p-a)\psi = 0$ qui s'écrit explicitement ainsi

$$\begin{pmatrix} 0 & (p_x - a_x) - i(p_y - a_y) \\ (p_x - a_x) + i(p_y - a_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{C.2}$$

système qui est équivalent à

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) f_- = 0 \\ \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) f_+ = 0 \end{cases} \tag{C.3}$$

ayant posé: $f_-(x,y) = e^{\phi(x,y)}\psi_-(x,y)$ et $f_+(x,y) = e^{-\phi(x,y)}\psi_+(x,y)$. (C.3) est équivalent aux équations de Cauchy-Riemann [5]; donc f_- est analytique en $\bar{z} = x - iy$ ($f_- \in H(\mathbb{C})$) et f_+ est analytique en $z = x + iy$ ($f_+ \in H(\mathbb{C})$).

Lorsque $|x| \to \infty$ on a $\phi(x) = \frac{\phi_0}{2\pi}\ln(|x|) + \mathcal{O}\left(|x|^{-1}\right)$, alors

$$e^{-\phi(z)} = |z| e^{-\phi_0/2\pi}\left(1 + \mathcal{O}\left(|z|^{-1}\right)\right) \qquad |z| \to \infty$$

Comme $\psi_+ \in L^2(\mathbb{R}^2)$ on a aussi $f_+ \in L^2(\mathbb{R}^2)$ et comme la seule fonction analytique dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ et la fonction zéro (voir lemme C.1 qui suit) on doit avoir $f_+ = 0$ ce qui montre que tout état solution de (C.2) a $\sigma_3 = -1$.
D'autre part aussi $\psi_- \in L^2(\mathbb{R}^2)$ et donc il en est de même pour $e^{-\phi}f_-$, or vu le comportement asymptotique de $e^{-\phi}$ et le fait que f_- est analytique, il faut que f_- ne croisse pas plus vite qu'un polynôme (en $\bar{z}$) de dégrée $n < \frac{\phi_0}{2\pi} - 1$. Or comme $\dim \mathbb{P}[n] = n+1$ on a $n + 1 = \left\{\frac{\phi_0}{2\pi}\right\}$ états propres avec valeur propre zéro. $\square$

Lemme C.1. *La seule fonction à la fois dans $H(\mathbb{C})$ et dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ est la fonction triviale.*

Preuve. Si $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$ alors

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^2} |f^2(x)|\, dx = A < \infty \tag{C.4}$$

Pour tout $0 \leq r < R < \infty$, $z_0 \in \mathbb{C}$ et $h \in H(\mathbb{C})$ posons

$$I_{r,R} = \int_{r<|z|<R} h(z + z_0)\, dx$$

($z = x_1 + ix_2$) on a

$$I_{r,R} = \pi h(z_0)(R^2 - r^2)$$

(passer en coordonnées polaires et utilser la formule de Cauchy), donc par (C.4), avec $h = f^2$,

$$|I_{r,R}| \leq A < \infty \tag{C.5}$$

Prenons alors la limite

$$\lim_{R\to\infty} \pi f^2(z_0)(R^2 - r^2)$$

elle existe et par (C.5) elle doit être finie, ce qui implique $f(z_0) = 0$ et donc $f \equiv 0$ □

Bibliographie

[1] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer

[2] J. Avron, I. Herbst, B. Simon, *Schrödinger operators with magnetic fields: I. General Interaction*, Duke Math. J. **45** (1978), 847-883

[3] J. Avron, I. Herbst, B. Simon, *Schrödinger operators with magnetic fields: III. Atoms in homogeneous magnetic field*, Commun. Math. Phys. **79** (1981), 529-572

[4] L. Bugliaro, J. Fröhlich and G.-M. Graf, *Stability of Quantum Electrodynamics with Nonrelativistic Matter*, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), 3494-3497

[5] S.D. Chatterji, *Cours d'Analyse: 2. Analyse complexe*, PPUR

[6] H.L. Cycon, R.G. Froese, W. Kirsch, B. Simon, *Schrödinger Operators*, Springer

[7] B. Dacorogna, *Introduction au calcul des variations*, PPUR

[8] C. Fefferman, J. Fröhlich and G.-M. Graf, *Stability of Ultraviolet-Cutoff: Quantum Electrodynamics with Non-Relativistic Matter*, Commun. Math. Phys. **190** (1997), 309-330

[9] J. Fröhlich, E.H. Lieb and M. Loss, *Stability of Coulomb Systems with Magnetic Field: I. The One-Electron Atom*, Commun. Math. Phys. **104** (1986), 251-270

[10] J.L. Lebowitz and E.H. Lieb *The Constitution of Matter: Existence of Thermodynamics for Systems Composed of Electrons and Nuclei*, Adv. in Math. **9** (1972), 316-398

[11] E.H. Lieb, *The Stability of Matter: From Atoms to Stars*, Springer

[12] E.H. Lieb, *The Stability of Matter*, Rev. Mod. Phys. **48** (1976), 553-569

[13] E.H. Lieb and B. Simon, *The Thomas-Fermi Theory of Atoms, Molecules and Solids*, Adv. in Math. **23** (1977), 22-116

[14] E.H. Lieb, *Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules*, Rev. Mod. Phys. **53** (1981), 603-641

[15] E.H. Lieb and S. Oxford *Improved Lower Bound on the Indirect Coulomb Energy*, Int. J. Quant. Chem. **19** (1981), 427-439

[16] E.H. Lieb, *On the lowest eigenvalue of the Laplacian for the intersection of two domains*, Invent. Math. **74** (1983), 441-448

[17] M. Loss and H.-T. Yau, *Stability of Coulomb Systems with Magnetic Field: III. Zero Energy Bounded States of the Pauli Operator*, Commun. Math. Phys. **104** (1986), 283-290

[18] P.A. Martin et F. Rothen, *Problèmes à N-corps et champs quantiques*, PPUR

[19] P.A. Martin, *L'intégrale fonctionnelle*, PPUR

[20] T. Ransford, *Potential theory in the complex plane*, London Math. Soc., Cambridge Univ. Press

[21] M. Reed and B. Simon, *I. Functional Analysis*, Accademic Press

[22] M. Reed and B. Simon, *II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Accademic Press

[23] A.E. Taylor and D.C. Lay, *Introduction to functional analysis*, J. Wiley and Sons