

Outils d'analyse et théorie spectrale pour la mécanique quantique

encadré par Arnaud TRIAY à Munich (Université Louis-et-Maximilien)

Pierre LARIVÉ

Mai-Juillet 2025

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution temporelle d'un système :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

But : étudier le spectre du hamiltonien H .



Exemple 1 *Cas d'étude*

Situation : N électrons autour d'un noyau fixe.

Espace de Hilbert : $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$

Hamiltonien :

$$H_N = \sum_{i=1}^N -\Delta_{x_i} + \sum_{i=1}^N V(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} W(x_i - x_j)$$

$$H_N = \sum_{i=1}^N -\Delta_{x_i} + \sum_{i=1}^N V(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} W(x_i - x_j) \quad \text{sur } L^2((\mathbb{R}^d)^N)$$

Difficulté : Domaine de H_N ?

Décomposition du spectre : $\sigma(H_N) = \sigma_{\text{disc}}(H_N) \sqcup \sigma_{\text{ess}}(H_N)$

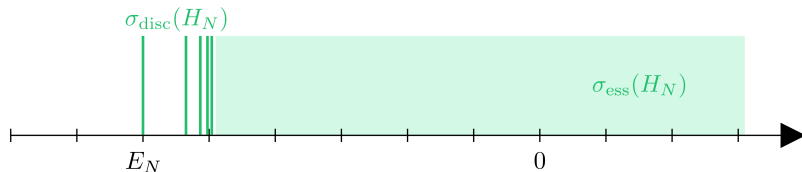


Figure – Allure du spectre de H_N .

Théorème 2 *Théorème HVZ*

Hypothèses sur les potentiels :

- ▶ $V, W : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ et W est pair (sens du modèle) ;
- ▶ $V, W \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$ avec $\max\left(\frac{d}{2}, 2\right) < p < +\infty$ et $V(x), W(x) \rightarrow 0$ lorsque $|x| \rightarrow \infty$ (régularité) ;
- ▶ $W \geq 0$ (interaction répulsive).

Alors pour tout $N \geq 1$, $\sigma_{\text{ess}}(H_N) = [E_{N-1}, +\infty[$.



Exemple 3 *Potentiel de Coulomb*

$$\frac{1}{|x|} = \frac{1}{|x|} \mathbf{1}_{\{|x| \leq 1\}} + \frac{1}{|x|} \mathbf{1}_{\{|x| \geq 1\}} \in L^p(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3) \quad \forall 2 < p < 3$$

🔗 Proposition 4 *Caractérisation du spectre essentiel*

Soit $\lambda \in \mathbb{R}$.

Alors $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H_N)$ si et seulement s'il existe une suite $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telle que :

- ▶ $\forall n \in \mathbb{N}, \|\psi_n\|_{L^2} = 1$;
- ▶ $\|(H_N - \lambda)\psi_n\|_{L^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$;
- ▶ $\psi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ faiblement dans L^2 .

Outils pour prouver le théorème HVZ : la localisation

	Avant localisation	Après localisation
Nombre de particules	N	Entre 0 et N
Espace d'états	$L^2((\mathbb{R}^d)^N)$	$\mathcal{F}(L^2(\mathbb{R}^d)) = \bigoplus_{n=0}^N L^2((\mathbb{R}^d)^n)$
États	$\psi(x_1, \dots, x_N)$	$\Gamma = 0 \oplus \dots \oplus \psi\rangle\langle\psi $ $\downarrow$ État localisé $(\Gamma)_B$

Détails techniques pour travailler avec l'espace de Fock :

nouvelle définition d'état

trace en dimension infinie

matrices de densité

opérateurs de création et d'annihilation

Quelle notion de convergence utiliser dans l'espace de Fock ?

$\psi_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$.

Mais la convergence faible est insuffisante si le nombre de particules peut varier.



Exemple 5

Soit $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in L^2(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$ normalisée, convergeant faiblement vers 0.

Alors $\phi_1 \otimes \phi_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $L^2((\mathbb{R}^d)^2)$.

Dans l'espace de Fock :

$$0 \oplus 0 \oplus |\phi_1 \otimes \phi_n\rangle \langle \phi_1 \otimes \phi_n| \xrightarrow{g} 0 \oplus |\phi_1\rangle \langle \phi_1| \oplus 0$$

Merci pour votre attention !