Mathématiques et Applications 87

Mathieu Lewin

Théorie spectrale et mécanique quantique

SMAI

Springer

Mathématiques et Applications

Volume 87

Le but de cette collection, créée par la Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles (SMAI), est d'éditer des cours avancés de Master et d'école doctorale ou de dernière année d'école d'ingénieurs. Les lecteurs concernés sont donc des étudiants, mais également des chercheurs et ingénieurs qui veulent s'initier aux méthodes et aux résultats des mathématiques appliquées. Certains ouvrages auront ainsi une vocation purement pédagogique alors que d'autres pourront constituer des textes de référence. La principale source des manuscrits réside dans les très nombreux cours qui sont enseignés en France, compte tenu de la variété des diplômes de fin d'études ou des options de mathématiques appliquées dans les écoles d'ingénieurs. Mais ce n'est pas l'unique source: certains textes pourront avoir une autre origine.

This series was founded by the "Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles" (SMAI) with the purpose of publishing graduate-level textbooks in applied mathematics. It is mainly addressed to graduate students, but researchers and engineers will often find here advanced introductions to current research and to recent results in various branches of applied mathematics. The books arise, in the main, from the numerous graduate courses given in French universities and engineering schools ("grandes écoles d'ingénieurs"). While some are simple textbooks, others can also serve as references.

More information about this series at https://link.springer.com/bookseries/2966

Mathieu Lewin

Théorie spectrale et mécanique quantique

Springer

Mathieu Lewin
CNRS & Université Paris-Dauphine
Université PSL
Paris, France

ISSN 1154-483X ISSN 2198-3275 (electronic)
Mathématiques et Applications
ISBN 978-3-030-93435-4 ISBN 978-3-030-93436-1 (eBook)
https://doi.org/10.1007/978-3-030-93436-1

Mathematics Subject Classification: 81Q10, 47-01

Funder Name: Horizon 2020 Framework Programme

This Springer imprint is published by the registered company Springer Nature Switzerland AG
The registered company address is: Gewerbestrasse 11, 6330 Cham, Switzerland

Préface

Petite introduction historique

À l'automne 1926, John von Neumann arrive à Göttingen en Allemagne pour travailler avec David Hilbert, le mathématicien le plus éminent de son époque. À seulement 22 ans, le jeune prodige von Neumann venait de terminer une thèse de mathématiques sur la théorie des ensembles à Budapest et avait également obtenu en parallèle un diplôme d'ingénieur en chimie à l'École Polytechnique de Zürich.

Il trouve à Göttingen une atmosphère survoltée. Les physiciens étaient en pleine invention de la mécanique quantique, qui décrit la matière à l'échelle microscopique. Werner Heisenberg, un jeune assistant de Max Born à Göttingen, avait proposé en 1925 sa théorie basée sur des sortes de matrices infinies [Hei25], formalisée ensuite avec Born et Pascual Jordan [BJ25, BHJ26]. D'un autre côté, l'autrichien Erwin Schrödinger avait plaidé l'année suivante pour une toute autre formulation, basée sur l'équation qui porte maintenant son nom [Sch26] et que Heisenberg aurait qualifiée de "dégoûtante" [Mac92]. Le britannique Paul Dirac avait lui tenté de réconcilier les deux visions dans sa "théorie des transformations" [Dir27], développée simultanément par Jordan [Jor27]. Celle-ci utilise des sortes de matrices à paramètres continus que l'on appellerait maintenant des noyaux intégraux. Pour la matrice identité, Dirac avait dû introduire une étrange "fonction" notée δ, valant 0 partout sauf à l'origine où elle est infinie, de sorte que son intégrale sur tout $\mathbb{R}$ soit égale à 1.

À près de 65 ans, Hilbert travaillait depuis de nombreuses années sur les problèmes spectraux. C'est lui qui avait d'ailleurs introduit le terme "spectre", en référence probablement aux fréquences de vibration des objets comme une corde ou un tambour. Sous l'influence des travaux de Fredholm aux alentours de 1900, il s'était fortement intéressé aux équations linéaires intégrales, c'est-à-dire faisant intervenir un noyau ressemblant aux matrices à paramètres continus de Dirac et Jordan. Dans un célèbre article de 1906 [Hil06], Hilbert avait proposé d'adopter une approche plus abstraite pour ce type d'équations, qu'il avait reformulées pour les coefficients de Fourier dans l'espace $\ell^2(\mathbb{C})$ des suites complexes de carré sommable.

Les opérations linéaires étaient alors justement vues comme des “matrices infinies”. Dans le même article, Hilbert avait aussi découvert que le spectre d’une telle “matrice” ne contenait pas nécessairement que des valeurs propres, et avait appelé le complémentaire “spectre continu”.

Born connaissait parfaitement les travaux de Hilbert car il avait été son étudiant en mathématique et était même devenu son assistant en 1904. Il s’en était fortement inspiré dans ses recherches avec Heisenberg et Jordan. Selon Heisenberg, “Hilbert a indirectement exercé une très forte influence sur le développement de la mécanique quantique”, qui ne “peut être complètement reconnue que par ceux qui ont étudié à Göttingen” [Rei70, p. 182].

Pour Hilbert, les mathématiques devaient jouer un rôle majeur dans ces développements. Lors de son allocution célèbre au congrès international de mathématiques à Paris en 1900, il avait en effet proposé comme sixième problème l’axiomatisation de la physique [Hil02]. Il s’était déjà lui-même fortement investi dans cette direction, en particulier pour la théorie cinétique des gaz et la relativité générale. Depuis 1912, il employait à plein temps un assistant personnel physicien, chargé de lui apprendre les dernières théories, qu’il reformulait à sa façon et enseignait ensuite immédiatement à ses élèves mathématiciens [SM09, Rei70, Sch19]. Lothar Nordheim était cet assistant depuis 1922 et il fut donc chargé, avec von Neumann, d’éclaircir la situation concernant la “nouvelle mécanique quantique”.

Von Neumann et Nordheim se penchent d’abord sur la théorie des transformations [HvN27] mais la fonction delta de Dirac les décourage vite. Pour les mathématiciens de l’époque, un tel objet ne pouvait clairement pas faire sens. C’est von Neumann qui comprend soudainement comment formuler la mécanique quantique en utilisant les notions abstraites d’espace de Hilbert et d’opérateurs auto-adjoints, qu’il introduit à cette occasion. En quelques mois, von Neumann produit ainsi une dizaine de travaux fondateurs sur ce sujet, qui révolutionneront à la fois l’analyse fonctionnelle et la physique mathématique.

Au début du vingtième siècle commençait seulement à émerger l’idée que les structures mathématiques abstraites pouvaient être utiles pour résoudre de façon plus efficace des problèmes concrets [Die81]. Fréchet avait introduit la notion d’espace métrique complet dans sa thèse en 1906, Riesz et Fischer avaient montré l’année suivante que l’espace des fonctions de carré intégrable au sens de Lebesgue était complet, puis introduit et étudié les espaces L^p en 1910. Hahn et Banach avaient ensuite développé la théorie abstraite des espaces normés complets au début des années 1920.

Von Neumann se place immédiatement dans cette mouvance. Après avoir expliqué sa formulation de la mécanique quantique dans trois articles fondateurs [von27a, von27c, von27b] en 1927, il s’attèle à développer la théorie mathématique correspondante. Dans un article [von29a] de 1929, il introduit la notion d’espace de Hilbert abstrait telle qu’on l’apprend encore aujourd’hui, puis étudie de façon approfondie la théorie des opérateurs sur ces espaces, en se concentrant sur ceux qui doivent nécessairement être définis sur un sous-espace strict de l’espace total, que l’on appelle “non bornés”. Son but est de discuter les opérateurs différentiels qui jouent un rôle central en mécanique quantique. Il comprend l'importance de distinguer la notion de symmétrie de celle d'auto-adjonction et, en 1930, parvient à montrer le théorème spectral [von30] sur la diagonalisation des opérateurs auto-adjoints, en s'inspirant de travaux précédents [Rie13] de Frigyes Riesz sur les opérateurs bornés. Un résultat similaire est obtenu de façon indépendante par l'américain Marshall Stone [Sto29, Sto30, Sto32].

La théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints non bornés résulte donc d'une atmosphère extrêmement propice, où questionnements physiques et raisonnements mathématiques se sont mutuellement influencés. Un siècle après son invention, la théorie de von Neumann joue toujours un rôle central dans de nombreuses branches des mathématiques. C'est un outil important qui sera utile à tout·e mathématicien·ne appliqué·e. L'opérateur Laplacien $\Delta = \sum_{j=1}^{d} \partial_{x_j}^2$ est bien évidemment un objet phare de cette théorie, qui intervient dans de nombreuses situations pratiques qu'il serait impossible d'énumérer ici.

Pourtant, la théorie de von Neumann est loin d'être intuitive et il est bon de prendre le temps d'étudier ses subtilités en détail. L'élément le plus dérangeant est sans doute le concept même d'opérateur auto-adjoint, qui est souvent source de confusions, même chez les mathématiciens professionnels. Par exemple, l'opérateur de dérivation $f \mapsto if'$ a une seule réalisation auto-adjointe possible sur $\mathbb{R}$, plusieurs sur l'intervalle $]0, 1[$, mais aucune sur $]0, +\infty[$. La théorie implique aussi que les "matrices infinies" prônées par Hilbert et ses collègues ne sont vraiment pas adaptées aux opérateurs non bornés. Deux opérateurs auto-adjoints peuvent très bien avoir les mêmes coefficients $\langle e_n, Ae_m\rangle$ dans une base hilbertienne (e_n) et pourtant être très différents, par exemple avoir des spectres complètement disjoints. Cette pathologie n'a d'ailleurs pas tellement été du goût de Hilbert...

Contenu du livre

Cet ouvrage propose une présentation intégrée de la théorie spectrale et de la mécanique quantique, proche de l'esprit dans lequel ces théories ont émergé. En plus des résultats abstraits, nous présenterons de multiples exemples concrets et tenterons d'expliquer le contexte physique. Aucune connaissance préalable en physique quantique n'est toutefois requise pour lire ces pages.

Le chapitre 1 est une rapide introduction mathématique à la mécanique quantique, qui devrait convenir à la fois à ceux qui n'ont pas du tout de notion dans ce domaine, et à ceux qui ont déjà de bonnes bases en physique quantique mais qui désirent en savoir plus sur ses aspects rigoureux.

Aux chapitres 2–5 nous développons la théorie spectrale selon les idées de von Neumann. Nous expliquons ce qu'est un opérateur auto-adjoint et comment on peut montrer en pratique qu'un opérateur particulier satisfait cette propriété. Puis nous discutons de sa diagonalisation et nous terminons par développer divers outils permettant d'étudier son spectre. Ces chapitres constituent évidemment le cœur du livre.

Les deux derniers chapitres sont des ouvertures vers des sujets plus avancés. Nous y énonçons des résultats de recherche plus récente sans toujours fournir toutes les preuves. Deux systèmes quantiques particuliers sont considérés. Le chapitre 6 est dédié aux électrons au sein d'un atome ou d'une molécule. C'est le système favori des chimistes quantiques, qui cherchent à comprendre les configurations spatiales de molécules ainsi que les réactions chimiques pouvant avoir lieu entre elles. Au chapitre 7 nous examinons les systèmes infinis périodiques qui interviennent dans la théorie de la matière condensée, par exemple lorsqu'on désire optimiser les propriétés de conduction des matériaux utilisés dans les composants électroniques. Ce sont deux sujets très importants du point de vue des applications, mais dont nous effleurerons seulement quelques aspects théoriques.

Finalement, l'appendice A est un résumé des propriétés des espaces de Sobolev qui jouent un rôle central dans tout le livre, et l'appendice B contient des problèmes détaillés sur des questions qui ont été passées sous silence dans le corps du texte mais méritent toutefois l'attention du lecteur.

Les **sections marquées d'une étoile*** sont des compléments que le lecteur pressé pourra sauter dans un premier temps.

Le texte est principalement issu d'un cours donné au département de mathématiques de l'École Polytechnique à partir de 2018, mais il a largement bénéficié de précédentes notes [Lew10, Lew17] écrites à diverses occasions.

Prérequis

Le texte suppose que le lecteur a de bonnes connaissances préalables sur

- la théorie élémentaire des espaces de Hilbert (bases hilbertiennes, projections, orthogonal d'un sous-espace, représentation de Riesz, etc),
- l'analyse fonctionnelle (complétude, graphe fermé, dualité, topologies faibles, opérateurs compacts, etc),
- la théorie de la mesure et des espaces de Lebesgue L^p,
- la théorie des distributions,
- les espaces de Sobolev.

Pour le lecteur ayant des lacunes ou souhaitant approfondir ses connaissances sur ces sujets, nous conseillons vivement l'ouvrage [LL01] d'Elliott H. Lieb et Michael Loss qui est devenu un standard en analyse. On pourra également consulter le livre de Haïm Brezis en français [Bre94] ou en anglais [Bre11].

Les **espaces de Sobolev** sont probablement les moins susceptibles d'avoir été appris auparavant. L'appendice A contient tout ce qui est nécessaire, avec les preuves des propriétés les plus importantes. Ces espaces interviennent dès le chapitre 1 mais commencent à jouer un rôle central à partir du chapitre 2, lorsqu'il est démontré que les opérateurs différentiels usuels sont fermés uniquement sur ces espaces. Nous conseillons au novice de lire l'appendice A après le chapitre 1 et de s'y référer aussi souvent que nécessaire.

Paris, France Mathieu Lewin
Octobre 2021

Table des matières