

# SÉMINAIRE N. BOURBAKI

PIERRE CARTIER

## **Spectre de l'équation de Schrödinger, application à la stabilité de la matière**

*Séminaire N. Bourbaki*, 1978, exp. n° 496, p. 88-104

[<http://www.numdam.org/item?id=SB\\_1976-1977\\_\\_19\\_\\_88\\_0>](http://www.numdam.org/item?id=SB_1976-1977__19__88_0)

© Association des collaborateurs de Nicolas Bourbaki, 1978, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire Bourbaki (<http://www.bourbaki.ens.fr/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme  
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

SPECTRE DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER ,  
APPLICATION A LA STABILITÉ DE LA MATIÈRE  
[d'après J. LEBOWITZ , E. LIEB , B. SIMON et  
W. THIRRING]

par Pierre CARTIER

### § 1. Introduction

Il y a 51 ans , Schrödinger mettait à la base de la Mécanique Quantique rénovée son équation célèbre

$$(1) \quad i\hbar \partial\psi/\partial t = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V\psi ,$$

où  $\psi(\underline{x}, t)$  est fonction du point  $\underline{x}$  de l'espace euclidien  $\mathbb{R}^3$  et du temps  $t$  ,  $\hbar$  est la constante de Planck et  $m$  la masse d'une particule se mouvant dans le potentiel  $V(\underline{x})$  . Les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien  $H = - (\hbar^2/2m) \Delta + V$  sont les niveaux d'énergie de la particule . De manière générale , on appelle état lié d'un système physique  $S$  composé de deux parties  $S_1$  et  $S_2$  un état où l'énergie totale  $E$  est strictement plus petite que la somme  $E_1 + E_2$  des énergies des deux parties prises isolément ; le système  $S$  dans cet état ne peut se scinder spontanément en ses deux composants  $S_1$  et  $S_2$  sans apport d'énergie extérieur . Transposant au cas qui nous occupe ici , on devra appeler état lié une fonction propre de  $H$  associée à une valeur propre négative .

Les problèmes fondamentaux liés à l'équation de Schrödinger sont les suivants :

a) prouver (sous des hypothèses convenables sur  $V$  ) que le spectre de l'opérateur  $H$  est borné inférieurement ;

b) donner des critères assurant qu'il n'y a pas d'état lié , ou un peu plus généralement , que l'opérateur auto-adjoint  $H$  est positif .

L'application des critères obtenus dans le problème b) à l'opérateur  $H - E$  , où  $E$  est une constante , permet d'estimer la borne inférieure  $\sigma(H)$  du spectre de  $H$  . Mentionnons aussi que préalablement à toute étude spectrale , il convient de préciser la définition de l'opérateur  $H$  , et en particulier son domaine , de manière à avoir un opérateur auto-adjoint ; nous reviendrons là-dessus au n° 2.3 .

Malgré leur caractère fondamental , ces problèmes n'ont été étudiés jusque vers 1965 que dans des cas particuliers , où l'on savait résoudre explicitement l'équation de Schrödinger , ou se ramener à un cas soluble par une approximation judicieuse . Depuis quelques années , on a appliqué avec succès les techniques de l'Analyse Fonctionnelle , qui ont donné d'importants résultats généraux . Le plus spectaculaire concerne la "stabilité de la matière" dont la première solution , due à Dyson et Lenard [8] , vient d'être énormément simplifiée par Lieb et Thirring [12] .

L'outil nouveau est un raffinement des inégalités de Sobolev classiques , avec détermination des meilleures constantes . Sous une forme plus générale , ces inégalités précisées ont été également obtenues par Th. Aubin , qui traite le cas du laplacien sur une variété riemannienne [1] ; Aubin a appliqué ces inégalités à la solution de certaines équations aux dérivées partielles non linéaires qui interviennent dans le problème de Yamabe en Géométrie Différentielle [3] . Il faut aussi remarquer que l'étude du spectre du laplacien sur une variété riemannienne , en rapport avec les longueurs des géodésiques fermées , a été très stimulée depuis quelques années par l'utilisation des méthodes que Maslov a introduites à propos de problèmes de Mécanique Quantique . La boucle se referme ....

## § 2. Le spectre de l'atome d'hydrogène

### 2.1. Rappels physiques

Voici d'abord la valeur numérique de quelques constantes physiques , exprimées dans le système d'unités C.G.S. électrostatique :

|                                  |                                         |
|----------------------------------|-----------------------------------------|
| $c = 2,997925 \cdot 10^{10}$     | vitesse de la lumière                   |
| $\hbar = 1,05450 \cdot 10^{-27}$ | constante de Planck ( $h = 2\pi\hbar$ ) |
| $e = 4,80298 \cdot 10^{-10}$     | charge électrique élémentaire           |
| $m_p = 1,67252 \cdot 10^{-24}$   | masse du proton                         |
| $m_e = 9,1091 \cdot 10^{-28}$    | masse de l'électron .                   |

Le spectre de l'atome d'hydrogène consiste en une série double de raies de longueur d'onde  $\lambda_{pq}$  (pour  $1 \leq p < q$  entiers) donnée par la formule

$$(2) \quad 1/\lambda_{pq} = R_H \left( \frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2} \right) .$$

Cette formule synthétise les trouvailles de Balmer , Lyman , ... en spectroscopie . La constante de Rydberg  $R_H$  pour l'hydrogène est égale à  $1,0967776 \cdot 10^5$  (en  $\text{cm}^{-1}$ ) ; elle est reliée aux constantes fondamentales par la formule de Bohr

$$(3) \quad R_H = me^4 / 4\pi\hbar^3 c \quad \text{avec} \quad m = m_p m_e / (m_p + m_e) .$$

Soit  $\nu_{pq} = c/\lambda_{pq}$  la fréquence associée à la longueur d'onde  $\lambda_{pq}$  ; les relations (2) et (3) peuvent encore s'écrire sous la forme

$$(4) \quad h\nu_{pq} = E_q - E_p$$

$$(5) \quad E_n = - me^4 / 2\hbar^2 n^2 .$$

On interprète ces formules en disant que les  $E_n$  sont les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène ; lorsque l'atome passe du niveau  $E_q$  au niveau  $E_p < E_q$ , il émet un photon d'énergie  $E = E_q - E_p$  ; ce photon correspond à une onde électromagnétique dont la fréquence  $\nu = \nu_{pq}$  est liée à l'énergie  $E$  par la relation de Planck  $E = h\nu$ . Le niveau d'énergie le plus bas, appelé aussi fondamental, est obtenu pour  $n = 1$ , soit  $E_1 = - me^4 / 2\hbar^2$ .

## 2.2. L'hamiltonien de l'hydrogène et son spectre

De manière un peu plus générale, nous considérons un électron de masse  $m_e$  et de charge électrique  $-e$  soumis au champ électrostatique d'un noyau de masse  $M$  et de charge électrique  $Ze$  ( $M = m_p$  et  $Z = 1$  pour l'hydrogène,  $M \approx 4m_p$  et  $Z = 2$  pour l'hélium ionisé  $\text{He}_4^{2+}$ ). On prend le noyau atomique comme origine du système de coordonnées. La masse réduite est donnée par  $m = M.m_e / (M + m_e)$  conformément à un résultat classique dans le problème des deux corps en Mécanique (le centre de gravité, non le noyau est fixe). Le potentiel électrostatique est alors donné par  $V(\underline{x}) = -Ze^2/|\underline{x}|^{-1}$ , où  $|\underline{x}|$  est la longueur d'un vecteur  $\underline{x}$  dans l'espace euclidien  $\mathbb{R}^3$ .

L'opérateur hamiltonien s'écrit alors sous la forme

$$(6) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{x}} - Ze^2/|\underline{x}|^{-1} ,$$

avec  $\Delta_{\underline{x}} = (\partial/\partial x_1)^2 + (\partial/\partial x_2)^2 + (\partial/\partial x_3)^2$ . On peut aussi écrire

$$(7) \quad H = |E_1| \cdot (-\Delta_{\underline{y}} - 2Z/|\underline{y}|^{-1})$$

avec  $|E_1| = me^4 / 2\hbar^2$  comme plus haut, en faisant le changement de variables  $\underline{x} = a_0 \cdot \underline{y}$  (où  $a_0 = \hbar^2 / me^2$ ).

Pour simplifier les formules, il est donc indiqué de prendre une unité d'énergie égale à  $|E_1|$ , appelée souvent le Rydberg, soit  $2,16789 \cdot 10^{-11}$  unités C.G.S., soit encore  $13,53154$  électron-volts ; pour unité de longueur, on prendra le "rayon de Bohr" égal à  $a_0 = 5,29053 \cdot 10^{-9}$  centimètres. On a encore le choix d'une unité fondamentale ; on fera ce choix de sorte qu'on ait  $\hbar = 1$ ,  $m = 0,5$  et  $e^2 = 2$  dans le nouveau système d'unités. L'hamiltonien prend alors la forme simple

$$(8) \quad H = -\Delta - 2Z|\underline{x}|^{-1} \quad .$$

Le spectre de  $H$  se décrit ainsi . En accord avec les résultats expérimentaux rappelés précédemment , les valeurs propres de  $H$  sont les nombres  $-Z^2/n^2$  où  $n$  parcourt l'ensemble des entiers strictement positifs ; pour  $Z = 1$  , ce sont les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène . Il faut y ajouter un spectre continu égal à l'intervalle  $[0, +\infty[$  .

De manière plus précise , on décompose au moyen de l'homéomorphisme de  $\underline{\mathbb{R}}^3 - \{0\}$  avec  $\underline{\mathbb{S}}^2 \times ]0, +\infty[$  l'espace de Hilbert  $L^2(\underline{\mathbb{R}}^3)$  en  $\bigoplus_{\ell=0}^{\infty} D_{\ell} \otimes L^2(0, +\infty)$  ; l'espace  $D_{\ell}$  se compose des harmoniques sphériques de degré  $\ell$  , c'est-à-dire les fonctions sur la sphère unité  $\underline{\mathbb{S}}^2$  qui se prolongent en un polynôme  $P(\underline{x})$  sur  $\underline{\mathbb{R}}^3$  , homogène de degré  $\ell$  et annulé par le laplacien  $\Delta$  . L'opérateur hamiltonien  $H$  se décompose alors en  $\bigoplus_{\ell=0}^{\infty} 1_{D_{\ell}} \otimes H_{\ell}$  avec

$$(9) \quad H_{\ell} = -\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r}\right) \quad .$$

Les valeurs propres de  $H_{\ell}$  sont de la forme  $-Z^2/n^2$  avec  $n > \ell$  entier ; la multiplicité de ces valeurs propres est égale à 1 , et la fonction propre correspondant à  $-Z^2/n^2$  est égale à  $R^{\ell} e^{-R/2} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(R)$  ; on a  $R = 2Zr/n$  et les polynômes de Laguerre sont définis par les formules usuelles

$$(10) \quad L_m^R(R) = e^R \left(\frac{d}{dR}\right)^m (R^m e^{-R}) \quad , \quad L_m^P(R) = \left(\frac{d}{dR}\right)^P L_m(R) \quad .$$

Comme  $D_{\ell}$  est de dimension  $2\ell+1$  , la multiplicité de  $-Z^2/n^2$  comme valeur propre de  $H$  est égale à  $\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) = n^2$  . De plus , le spectre continu de  $H_{\ell}$  est absolument continu , de multiplicité 1 , et se compose de l'intervalle  $[0, +\infty[$  .

### 2.3. L'opérateur auto-adjoint $H = -\Delta + V$ ; son domaine

Commençons par décrire le laplacien  $\Delta$  . La transformée de Fourier d'une fonction  $f$  appartenant à  $L^2(\underline{\mathbb{R}}^3)$  est définie par

$$(11) \quad \hat{f}(\underline{p}) = \int_{\underline{\mathbb{R}}^3} f(\underline{x}) e^{-i\underline{p} \cdot \underline{x}} d\underline{x} \quad .$$

Pour tout entier  $s \geq 0$  , l'espace de Sobolev  $H_s$  se compose des fonctions  $f$  dans  $L^2(\underline{\mathbb{R}}^3)$  telles que l'intégrale  $\int |\underline{p}|^{2s} |\hat{f}(\underline{p})|^2 d\underline{p}$  soit finie ; en particulier , on a  $H_0 = L^2(\underline{\mathbb{R}}^3)$  . Le laplacien est l'opérateur  $\Delta : H_2 \rightarrow H_0$  défini par

$$(12) \quad \widehat{\Delta f}(\underline{p}) = -|\underline{p}|^2 \hat{f}(\underline{p}) \quad .$$

Considéré comme opérateur dans  $H_0$  , de domaine  $H_2$  , il est auto-adjoint .

On dit qu'une fonction  $V$  sur  $\underline{\mathbb{R}}^3$  satisfait aux conditions de Kato si elle est

somme d'une fonction de carré intégrable et d'une fonction mesurable et bornée ; c'est le cas pour  $V(\underline{x}) = -2Z|\underline{x}|^{-1}$ . On montre par transformation de Fourier que toute fonction de  $\underline{H}_2$  est continue et bornée (résultat qui ne s'étend pas en dimension  $\geq 4$ ) ; si  $V$  satisfait aux conditions de Kato, alors  $Vf$  appartient à  $\underline{H}_0$  pour toute fonction  $f$  dans  $\underline{H}_2$ . De plus, Kato a montré dans [11] que l'opérateur  $H : \underline{H}_2 \rightarrow \underline{H}_0$  défini par  $Hf = -\Delta f + Vf$  est auto-adjoint dans  $\underline{H}_0$ .

Pour traiter des fonctions  $V$  plus générales, nous utiliserons la méthode des formes quadratiques. Cette méthode est un approfondissement de la méthode d'extension d'un opérateur symétrique introduite par Friederichs en 1935 ; elle est exposée en détail dans le livre de B.Simon [21]. Soit  $T$  un opérateur auto-adjoint dans un espace de Hilbert  $\underline{H}$ , de domaine  $\underline{D}_T$  ; soit  $m$  la mesure spectrale de  $T$ , et pour tout  $f$  dans  $\underline{H}$ , soit  $m_f$  la mesure scalaire sur la droite  $\underline{R}$  définie par  $m_f(A) = \langle f | m(A).f \rangle$  pour toute partie mesurable  $A$  de  $\underline{R}$ . Le domaine  $\underline{D}_T$  se compose des vecteurs  $f$  dans  $\underline{H}$  tels que l'intégrale  $\int |t|^2 dm_f(t)$  soit finie. Considérons alors l'ensemble  $\underline{Q}_T$  des vecteurs  $f$  dans  $\underline{H}$  tels que l'intégrale  $\int |t| dm_f(t)$  soit finie, et posons

$$(13) \quad q_T[f] = \int_{\underline{R}} t dm_f(t) \quad \text{pour tout } f \text{ dans } \underline{Q}_T.$$

Alors  $\underline{Q}_T$  est un sous-espace vectoriel dense de  $\underline{H}$ , contenant  $\underline{D}_T$ , et  $q_T$  est une forme quadratique sur  $\underline{Q}_T$  (au sens hermitien  $q_T[cf] = |c|^2 q_T[f]$  pour tout nombre complexe  $c$ ). De plus, on a

$$(14) \quad q_T[f] = \langle f | Tf \rangle \quad \text{pour } f \text{ dans } \underline{D}_T.$$

On a par exemple  $\underline{Q}_\Delta = \underline{H}_1$  et pour l'opérateur de multiplication par une fonction mesurable  $V$ , l'espace  $\underline{Q}_V$  se compose des fonctions  $f$  dans  $\underline{H}_0$  telles que l'intégrale  $\int |V| |f|^2 d\underline{x}$  soit finie. De plus, on a

$$(15) \quad q_{-\Delta}[f] = \int |\nabla f|^2 d\underline{x} \quad \text{pour } f \text{ dans } \underline{H}_1$$

$$(16) \quad q_V[f] = \int V |f|^2 d\underline{x} \quad \text{pour } f \text{ dans } \underline{Q}_V.$$

Dans la formule (15),  $\nabla f$  est le gradient de  $f$  ; il a pour composantes les dérivées  $\partial f / \partial x_j$  prises au sens des distributions, qui appartiennent à  $\underline{H}_0$  par définition de l'espace de Sobolev  $\underline{H}_1$ . De plus, on a  $|\nabla f|^2 = \sum_{j=1}^3 |\partial f / \partial x_j|^2$ .

Nous faisons maintenant deux hypothèses sur la fonction  $V$  :

- a) l'espace  $\underline{H}_1 = \underline{Q}_\Delta$  est contenu dans  $\underline{Q}_V$  ;
- b) il existe un nombre réel  $c$  tel que l'on ait l'inégalité

$$(17) \quad q_{-\Delta}[f] + q_V[f] \geq c \int |f|^2 d\underline{x}$$

pour toute fonction  $f$  dans  $\underline{H}_1$ .

On définit une forme sesquilinéaire sur  $\underline{H}_1$  en posant

$$(18) \quad \langle f|g \rangle_H = \int \overline{\nabla f} \cdot \nabla g \, d\underline{x} + \int \overline{Vf}g \, d\underline{x},$$

d'où

$$(19) \quad \langle f|f \rangle_H = q_{-\Delta}[f] + q_V[f] \quad \text{pour toute fonction } f \text{ dans } \underline{H}_1.$$

On note  $\underline{D}_H$  l'ensemble des fonctions  $f$  de  $\underline{H}_1$  pour lesquelles il existe une fonction  $f_1$  dans  $\underline{H}_0$  satisfaisant à

$$(20) \quad \langle g|f \rangle_H = \int \overline{g}f_1 \, d\underline{x} \quad \text{pour toute fonction } g \text{ dans } \underline{H}_1.$$

Cette fonction  $f_1$  est unique et sera notée  $Hf$ ; alors l'opérateur  $H: \underline{D}_H \rightarrow \underline{H}_0$  est auto-adjoint dans  $\underline{H}_0$ . De plus, le domaine  $\underline{Q}_H$  de la forme quadratique  $q_H$  associée à  $H$  est égal à  $\underline{H}_1 = \underline{Q}_{-\Delta}$ , et l'on a

$$(21) \quad q_H[f] = q_{-\Delta}[f] + q_V[f] \quad \text{pour toute fonction } f \text{ dans } \underline{H}_1.$$

L'opérateur  $H$  mérite donc le nom de somme de  $-\Delta$  et de  $V$ . D'ailleurs, toute fonction de classe  $C^2$  à support compact appartient à  $\underline{D}_H$  et l'on a  $Hf = -\Delta f + Vf$  pour une telle fonction  $f$ . Lorsque  $V$  satisfait aux hypothèses de Kato, on a  $\underline{D}_H = \underline{H}_2$  et  $Hf = -\Delta f + Vf$  pour toute fonction  $f$  dans  $\underline{H}_2$ , de sorte qu'on retrouve pour  $H$  l'opérateur défini par Kato.

#### 2.4. Quelques estimations élémentaires

Il reste à étudier les conditions a) et b) ci-dessus. La relation a) signifie que la multiplication par  $|V|^{1/2}$  envoie  $\underline{H}_1$  dans  $\underline{H}_0$  et ressortit à la théorie bien connue des multiplicateurs dans la transformation de Fourier. L'hypothèse b) s'explique par la relation intégrale

$$(22) \quad \int \{ |\nabla f|^2 + V|f|^2 \} d\underline{x} \geq c \int |f|^2 d\underline{x}$$

à satisfaire pour toute fonction  $f$  dans  $\underline{H}_1$ . En fait, un argument facile d'approximation montre qu'il suffit de vérifier (22) par exemple lorsque  $f$  est de classe  $C^\infty$  à support compact (en abrégé,  $f \in C_c^\infty(\underline{R}^3)$ ).

Soit  $\Phi$  une fonction strictement positive <sup>/de</sup> classe  $C^\infty$  dans  $\underline{R}^3$ . Posons  $\varrho = \Phi^2$  et définissons la fonction  $V_1$  par  $\Delta \Phi = V_1 \Phi$ . Pour toute fonction  $f$  dans  $C_c^\infty(\underline{R}^3)$ , on a

$$\nabla(f\Phi) = f\nabla\Phi + \Phi\nabla f,$$

d'où

$$\begin{aligned} |\nabla(f\Phi)|^2 &= |f|^2 |\nabla\Phi|^2 + \Phi \nabla\Phi \cdot \nabla(|f|^2) + \Phi^2 |\nabla f|^2 \\ &= \nabla \cdot (\Phi |f|^2 \nabla\Phi) - |f|^2 \Phi \Delta\Phi + \Phi^2 |\nabla f|^2 ; \end{aligned}$$

par intégration sur  $\mathbb{R}^3$ , le terme de divergence  $\nabla \cdot \underline{A}$  disparaît, et l'on trouve

$$(23) \quad \int \{ |\nabla(f\Phi)|^2 + V|f\Phi|^2 \} d\underline{x} = \int \{ |\nabla f|^2 + (V - V_1) |f|^2 \} e d\underline{x} .$$

Comme on a par ailleurs  $\int |f\Phi|^2 d\underline{x} = \int |f|^2 e d\underline{x}$ , l'égalité (22) sera satisfaite pourvu que l'on ait  $V - V_1 \geq c$ .

Supposons d'abord que  $\Phi$  appartienne à  $\underline{H}_2$  et que l'on ait  $V_1 = V - c$ , c'est-à-dire  $H\Phi = c\Phi$ . On a alors  $\langle f|Hf \rangle \geq c \langle f|f \rangle$  pour toute fonction  $f$  dans  $\underline{D}_H$  d'après le calcul précédent et  $c$  est donc la borne inférieure  $\sigma(H)$  du spectre de  $H$ . Normalisons  $\Phi$  par  $\int |\Phi|^2 d\underline{x} = 1$ . Alors la fonction  $\Phi$  est l'état fondamental pour l'hamiltonien  $H$ , et la mesure  $e d\underline{x}$  sur  $\mathbb{R}^3$  est la loi de probabilité de l'électron dans l'état fondamental. Tout ceci est conforme au vieil adage : " la fonction d'onde de l'état fondamental n'a pas de noeud (= zéro) ". Par exemple<sup>1</sup>, pour  $V(\underline{x}) = -2Z|\underline{x}|^{-1}$ , on pourra prendre  $\Phi(\underline{x}) = e^{-Z|\underline{x}|}$  et  $c = -Z^2$ ; par suite  $-Z^2$  est la borne inférieure du spectre de  $-\Delta - 2Z|\underline{x}|^{-1}$ , ce que nous savions déjà par les résultats plus précis rappelés au n° 2.2.

Revenons au cas général pour  $V$ . On pourra<sup>1</sup> prendre  $\Phi(\underline{x}) = |\underline{x}|^{-1/2}$ , d'où  $V_1(\underline{x}) = -1/4|\underline{x}|^2$  et donc l'estimation

$$(24) \quad \sigma(H) \geq \inf_{\underline{x}} \left\{ V(\underline{x}) + \frac{1}{4} |\underline{x}|^{-2} \right\}$$

(voir Courant et Hilbert, page 446 pour ce calcul). Dans le cas coulombien

$V(\underline{x}) = -2Z|\underline{x}|^{-1}$ , on obtient ainsi l'estimation  $\sigma(H) \geq -4Z^2$ , que l'on comparera à la valeur exacte  $\sigma(H) = -Z^2$ .

### § 3. Inégalités en tous genres

#### 3.1. Réarrangement sphérique

Soit  $f$  une fonction mesurable et positive sur l'espace euclidien  $\mathbb{R}^n$ . On suppose que pour tout nombre réel  $c \geq 0$ , l'ensemble  $\{f \geq c\}$  des points  $\underline{x}$  tels que  $f(\underline{x}) \geq c$  est de mesure finie. On montre facilement qu'il existe une unique fonction  $f_S$  sur  $\mathbb{R}^n$

<sup>1</sup> La fonction  $\Phi$  n'est de classe  $C^\infty$  qu'en dehors de l'origine. Mais comme  $C_c^\infty(\mathbb{R}^n - \{0\})$  est dense dans  $\underline{H}_1$ , on adapte sans peine les raisonnements précédents.



avec les propriétés suivantes :

- a) la fonction  $f_S$  est mesurable et positive sur  $\mathbb{R}^n$  ;
  - b) il existe une fonction décroissante  $u : [0, +\infty[ \rightarrow [0, +\infty[$  telle que  $f_S(\underline{x}) = u(|\underline{x}|)$  pour tout  $\underline{x}$  dans  $\mathbb{R}^n$  ;
  - c) pour tout nombre réel  $c \geq 0$ , les ensembles  $\{f \geq c\}$  et  $\{f_S \geq c\}$  ont même mesure .
- La fonction  $f_S$  s'appelle le réarrangement sphérique (décroissant) de  $f$  . On pourra consulter le chapitre 10 du livre classique [9] de Hardy , Littlewood et Polya sur ce sujet . On prouve facilement l'inégalité

$$(25) \quad \int f(\underline{x}) u(|\underline{x}|) d\underline{x} \leq \int f_S(\underline{x}) u(|\underline{x}|) d\underline{x}$$

pour toute fonction  $u$  décroissante et positive sur  $[0, +\infty[$  (commencer par le cas de la fonction caractéristique  $u = I_{[0,c]}$  pour  $c \geq 0$ ) .

Le théorème suivant a été prouvé pour  $q = n$  par G. Mostow [17, page 88] . La démonstration que nous donnons est due à Th. Aubin (non publiée) ; les mêmes idées , sous une forme moins rigoureuse , se trouvent dans [10, page 184] pour  $q = 2$  et  $n = 3$  .

**THÉORÈME 3.1** - Soit  $K$  une pièce compacte dans  $\mathbb{R}^n$  (au sens de Bourbaki<sup>2</sup>) . Supposons que la fonction  $f$  sur  $\mathbb{R}^n$  soit nulle en dehors de  $K$  , coïncide sur  $K$  avec une fonction de classe  $C^\infty$  sur  $\mathbb{R}^n$  et que le gradient  $\nabla f$  de  $f$  ne s'annule qu'en un nombre fini de points de  $K$  , où le hessien de  $f$  ne s'annule pas . Pour tout nombre  $q \geq 1$  , on a l'inégalité

$$(26) \quad \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f_S|^q d\underline{x} \leq \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^q d\underline{x} .$$

Soient  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_r$  les points de  $K$  où s'annule  $\nabla f$  , et soient  $c_1 = f(\underline{x}_1), \dots, c_r = f(\underline{x}_r)$  les valeurs critiques de  $f$  . Pour tout nombre  $c \geq 0$  , on note  $U(c)$  la mesure commune des ensembles  $\{f \geq c\}$  et  $\{f_S \geq c\}$  , et l'on pose

$$J(c) = \int_{f \geq c} |\nabla f|^q d\underline{x} , \quad J_S(c) = \int_{f_S \geq c} |\nabla f_S|^q d\underline{x} .$$

On voit facilement que la fonction  $f_S$  est de classe  $C^\infty$  en tout point  $\underline{x}$  tel que  $f_S(\underline{x})$  ne soit pas une valeur critique . Supposons que  $c > 0$  ne soit pas une valeur critique ; alors les fonctions  $J$  ,  $J_S$  et  $U$  sont de classe  $C^\infty$  en  $c$  , l'ensemble  $\{f = c\}$  est une sous-variété de dimension  $n-1$  de  $\mathbb{R}^n$  , et les dérivées des fonctions  $J$  ,  $J_S$  et  $U$  se calculent par les formules

$$-U'(c) = \int_{f=c} |\nabla f|^{-1} d\sigma = \int_{f_S=c} |\nabla f_S|^{-1} d\sigma$$

<sup>2</sup> Autrement dit , pour tout point  $\underline{x}$  de  $K$  , il existe un voisinage ouvert  $U$  de  $\underline{x}$  dans  $\mathbb{R}^n$  et une fonction  $h$  de classe  $C^\infty$  dans  $U$  telle que  $\nabla h(\underline{x}) \neq 0$  et  $K \cap U = \{h \geq 0\}$  .

$$- J'(c) = \int_{f=c} |\nabla f|^{q-1} d\sigma, \quad - J'_S(c) = \int_{f_S=c} |\nabla f_S|^{q-1} d\sigma,$$

où  $d\sigma$  désigne la mesure  $(n-1)$ -dimensionnelle.

L'inégalité de Hölder appliquée à l'intégration sur  $\{f=c\}$  donne

$$(27) \quad \int_{f=c} d\sigma \leq |U'(c)|^{1-1/q} |J'(c)|^{1/q}.$$

Par contre, la variété  $\{f_S = c\}$  est une sphère sur laquelle  $|\nabla f_S|$  est constant, d'où une égalité

$$(28) \quad \int_{f_S=c} d\sigma = |U'(c)|^{1-1/q} |J'_S(c)|^{1/q}.$$

Or la pièce compacte  $\{f \geq c\}$  a même volume que la sphère  $\{f_S \geq c\}$ . D'après l'inégalité isopérimétrique, on a donc  $\int_{f=c} d\sigma \geq \int_{f_S=c} d\sigma$ , d'où finalement  $|J'(c)| \geq |J'_S(c)|$  lorsque  $c$  est distinct des valeurs critiques  $c_1, \dots, c_r$ . Par intégration sur  $c$ , on en déduit l'inégalité (26).

### 3.2. Une inégalité de Sobolev précisée

L'espace de Sobolev  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$  se compose des fonctions absolument continues sur  $\underline{\mathbb{R}}$ , qui sont de carré intégrable ainsi que leur dérivée. C'est un espace de Hilbert, dont la norme est donnée par

$$(29) \quad \|u\|^2 = \int_{\underline{\mathbb{R}}} \left\{ |u'(t)|^2 + \frac{1}{4} |u(t)|^2 \right\} dt.$$

Le théorème suivant précise dans un cas particulier les résultats classiques de Sobolev [22], [23] et [24].

**THÉORÈME 3.2 -** Pour tout nombre  $k > 2$ , on a  $H_1(\underline{\mathbb{R}}) \subset L^k(\underline{\mathbb{R}})$  et la norme de l'inclusion de  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$  dans  $L^k(\underline{\mathbb{R}})$  est le nombre  $N_k$  défini par

$$(30) \quad 1/N_k = (k/2)^{1/2} [(p/2 - 1)\Gamma(p/2)^2/\Gamma(p)]^{1/p} \quad (1/p = 1/2 - 1/k).$$

Soit  $c > 0$ . On note  $\underline{H}(c)$  le sous-espace fermé de  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$  formé des fonctions nulles en dehors de l'intervalle  $[-c, c]$ . Pour toute fonction  $u$  dans  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$ , on a  $|u(t) - u(t')| \leq \|u\| \cdot |t - t'|^{1/2}$  quels que soient  $t$  et  $t'$  dans  $\underline{\mathbb{R}}$ . De plus, on a  $\|u\| \leq 1$  si et seulement si l'on a

$$(31) \quad \left| \int u(t) \left[ \frac{1}{4} \varphi(t) - \varphi''(t) \right] dt \right| \leq \|\varphi\|$$

pour toute fonction  $\varphi$  de classe  $C^2$  à support compact. D'après le théorème d'Ascoli, l'intersection  $B(c)$  de la boule unité de  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$  avec  $\underline{H}(c)$  est donc compacte pour la convergence uniforme. Notons  $\|u\|_k$  la norme dans  $L^k(\underline{\mathbb{R}})$  et posons  $N(c) = \sup_{u \in B(c)} \|u\|_k$ . Comme les fonctions à support compact sont denses dans  $H_1(\underline{\mathbb{R}})$ , on a

$$(32) \quad N_k = \lim_{c \rightarrow \infty} N(c) \quad (\text{limite croissante}).$$

Comme la fonctionnelle  $u \mapsto \|u\|_k$  est continue sur l'espace compact  $B(c)$ , il existe une fonction  $u_c$  dans  $\underline{H}(c)$  telle que  $\|u_c\| \leq 1$  et  $\|u_c\|_k = N(c)$ . La fonction  $u_c$  réalise le minimum de la fonctionnelle  $J : u \mapsto \|u\|/\|u\|_k$  sur  $\underline{H}(c)$ ; mais  $J$  est différentiable au sens de Fréchet et sa différentielle s'annule donc pour  $u_c$ . On en déduit qu'il existe une constante  $a$  telle que  $u_c$  soit solution de l'équation différentielle

$$(33) \quad u'' = \frac{1}{4} u - a u^{k-1} \operatorname{sgn}(u)$$

avec les conditions aux limites  $u(-c) = u(c) = 0$ . D'après (33),  $u'^2 - \frac{1}{4}u^2 + \frac{2a}{k}|u|^k$  est égale à une constante  $b$ ; quitte à multiplier  $u$  par une constante, on se ramène au cas où  $b = \frac{2a}{k} - \frac{1}{4}$ .

Introduisons la courbe  $\Gamma_a$  dans  $\mathbb{R}^2$  d'équation

$$(34) \quad y^2 = \frac{1}{4}x^2 - \frac{2a}{k}|x|^k + \frac{2a}{k} - \frac{1}{4},$$

homéomorphe à un cercle, et la période  $\pi(a) = \int_{\Gamma_a} dx/y$ . L'application  $\pi$  est un homéomorphisme décroissant de l'intervalle  $]k/8, +\infty[$  sur l'intervalle  $]0, +\infty[$ . De plus, il existe une unique solution  $u(x;a)$  de l'équation différentielle (33) telle que  $u(0;a) = 1$ ,  $u'(0;a) = 0$ ; on a  $u(x + \pi(a);a) = u(x;a)$ . Si  $n-1$  est le nombre des zéros de  $u_c$  dans l'intervalle  $]-c,c[$ , on a  $u_c(x) = u(x; \pi^{-1}(4c/n))$ ; si  $u_{n,c}$  est cette dernière fonction, un calcul direct montre que l'on a  $J(u_{1,c}) < J(u_{n,c})$  pour  $n > 1$  et comme  $u_c$  minimise  $J$ , on a donc  $n = 1$  d'où  $u_c(x) = u(x; \pi^{-1}(4c))$ .

Le nombre  $1/N(c) = J(u_c)$  est alors égal à

$$a^{1/2} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Gamma_a} |x|^k dx/y \right\}^{1/p} \quad \text{avec } a = \pi^{-1}(4c).$$

Lorsque  $c$  tend vers l'infini,  $a$  tend vers  $k/8$ , d'où

$$(35) \quad 1/N_k = \left(\frac{k}{8}\right)^{1/2} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Gamma_{k/8}} |x|^k dx/y \right\}^{1/p}.$$

De là, on déduit facilement la formule (30).

### 3.3. L'inégalité de Glaser, Martin, Grosse et Thirring

Cette inégalité, qu'on désignera par le sigle GMCT, est valable pour  $1 < q \leq 3$  et se formule ainsi

$$(36) \quad \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla f|^2 dx \geq \gamma(q) \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} |x|^{q-3} |f(x)|^{2q} dx \right\}^{1/q};$$

la constante  $\gamma(q)$  est égale à  $\delta(p)$  avec  $p^{-1} + q^{-1} = 1$  et

$$(37) \quad \delta(p) = [4\pi p \Gamma(p)^2 / (p-1)^{p-1} \Gamma(2p)]^{1/p}.$$

Pour  $q = 3$ ,  $p = 3/2$ , on a en particulier

$$(38) \quad \int |\nabla f|^2 d\underline{x} \geq c \left[ \int |f|^6 d\underline{x} \right]^{1/3}$$

avec  $c = 3.(\pi/2)^{4/3} = 5,477904090\dots$ . Ce cas particulier a été établi par G. Rosen [18], dont la démonstration demanderait à être détaillée.

La démonstration de l'inégalité GMGT procède selon les étapes suivantes :

a) L'espace  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$  est dense dans l'espace de Sobolev  $H_1(\mathbb{R}^3)$ , et il suffit donc de prouver GMGT pour une fonction  $f$  appartenant à  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ .

b) Un lemme classique de théorie de Morse (voir Milnor [16, page 37]) montre que toute fonction de  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$  est limite dans  $H_1(\mathbb{R}^3)$  d'une suite de fonctions satisfaisant aux conditions du théorème 3.1.

c) Faisons l'hypothèse  $1 < q \leq 3$ ; comme la fonction  $t \mapsto t^{q-3}$  sur  $[0, +\infty[$  est décroissante, l'inégalité (25) et le théorème 3.1 montrent qu'il suffit de prouver GMGT lorsque  $f = f_S$ . Écrivons alors  $f$  sous la forme  $f(\underline{x}) = |\underline{x}|^{-1/2} v(|\underline{x}|)$ . On transforme l'intégrale  $\int |\nabla f|^2 d\underline{x}$  comme au haut de la page 496-07, puis l'on pose  $u(t) = v(e^t)$ . Pour terminer, il suffit alors d'appliquer le théorème 3.2 avec  $k = 2q$ .

Revenons à l'hamiltonien  $H = -\Delta + V$ . Supposons  $p \geq 3/2$ . Pour la forme quadratique associée à  $H$ , on a l'inégalité

$$(39) \quad q_H[f] \geq \int |\nabla f|^2 d\underline{x} \cdot \left\{ 1 - \delta(p)^{-1} \inf_{\underline{y}} \int |\underline{y} - \underline{x}|^{2p-3} v_-(\underline{x})^p d\underline{x} \right\}.$$

Pour prouver cette inégalité, on remarque d'abord qu'en remplaçant  $f(\underline{x})$  par  $f(\underline{x} + \underline{y})$  dans GMGT, on obtient une inégalité apparemment plus générale, où  $|\underline{x}|^{q-3}$  est remplacé par  $|\underline{y} - \underline{x}|^{q-3}$  au second membre. On décompose ensuite  $V$  en sa partie positive et sa partie négative, soit  $V = V_+ - V_-$ , d'où  $q_V[f] \geq - \int V_- |f|^2 d\underline{x}$ . On applique ensuite l'inégalité de Hölder sous la forme

$$(40) \quad \int V_- |f|^2 d\underline{x} \leq \left[ \int |\underline{y} - \underline{x}|^{2p-3} v_-(\underline{x})^p d\underline{x} \right]^{1/p} \left[ \int |\underline{y} - \underline{x}|^{q-3} |f(\underline{x})|^{2q} d\underline{x} \right]^{1/q},$$

et l'on majore le deuxième terme du produit de droite en utilisant la forme généralisée de GMGT.

De la formule (39), on déduit aussitôt le critère suivant :

THÉORÈME 3.3 - Supposons que la multiplication par  $|V|^{1/2}$  applique l'espace de Sobolev  $H_1(\mathbb{R}^3)$  dans  $H_0(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^3)$ . On a alors  $\sigma(H) \geq c$  pour tout nombre réel  $c$  pour lequel il existe  $p \geq 3/2$  avec

$$(41) \quad \inf_{\underline{y}} \int |\underline{y} - \underline{x}|^{2p-3} (V(\underline{x}) - c)_-^p d\underline{x} \leq \delta(p).$$

Par exemple, lorsque  $V = -2Z|\underline{x}|^{-1}$ , on obtient  $\sigma(H) \geq -4Z^2/3$  en prenant  $p=3/2$ . On renvoie à [10, page 184] pour une table numérique montrant que pour les potentiels

usuels  $V$ , on peut choisir  $p$  dans le critère précédent de manière à obtenir un nombre  $c$  très voisin de  $\sigma(H)$ .

### 3.4. Autres inégalités

a) Th. Aubin a donné dans [1] une forme précisée de l'inégalité de Sobolev (pour  $1 \leq q < n$ )

$$(42) \quad \|f\|_p \leq K(n,q) \|\nabla f\|_q ;$$

elle est valable pour toute fonction  $f$  dans  $L^q(\mathbb{R}^n)$  dont les dérivées  $\partial f / \partial x_j$  prises au sens des distributions appartiennent à  $L^q(\mathbb{R}^n)$  pour  $1 \leq j \leq n$ , le nombre  $p$  est défini par  $1/p = 1/q - 1/n$  et l'on a posé

$$(43) \quad \|\nabla f\|_q = \left[ \int |\nabla f|^q d\mathbf{x} \right]^{1/q} .$$

Enfin, la constante  $K(n,q)$  est égale à

$$(44) \quad K(n,q) = (n-q)^{1/q-1/n-1} n^{-1/q} (q-1)^{1-1/q} \left\{ \frac{q\Gamma(n+1)}{\Gamma(n/q-1)\Gamma(n+1-n/q)\sigma_n} \right\}^{1/n}$$

où  $\sigma_n = 2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$  est l'aire de la sphère unité dans  $\mathbb{R}^n$ .

Les arguments de Th. Aubin sont analogues à ceux de ce paragraphe, mais il remplace le théorème 3.2 par une inégalité due à G. Bliss [6]. Il est facile d'imaginer une formule englobant les formules (36) et (42), seul le calcul de la meilleure constante pose un problème. Pour cela, il suffirait de connaître la meilleure constante dans une inégalité due à Hardy et Littlewood [9, page 298, exercice 401]; moyennant certaines inégalités portant sur les paramètres  $h, k, \lambda, p, q$  elle s'énonce ainsi

$$(45) \quad \int_0^\infty \int_0^\infty f(x)g(y)x^{-h}y^{-k}|x-y|^{h+k-\lambda} dx dy \leq K \|f\|_p \|g\|_q ,$$

les fonctions  $f$  et  $g$  étant mesurables et positives sur  $[0, +\infty[$ .

b) On trouvera dans [4] une démonstration du résultat suivant. Soit  $c$  un nombre réel; s'il existe un nombre  $a > 0$  tel que  $\int e^{-a(V-c)} d\mathbf{x} \leq e^{3(\pi a)^{3/2}}$ , on a  $\sigma(H) \geq c$ .

c) Dans le théorème 3.3, on peut supprimer la restriction  $p \geq 3/2$  de la manière suivante. Supposons que  $V$  soit invariant par les rotations autour de l'origine et que  $p \geq 1$ ; on a alors  $\sigma(H) \geq c$  pour tout nombre réel  $c$  tel que

$$(46) \quad \int |\mathbf{x}|^{2p-3} (V(\mathbf{x}) - c)_-^p d\mathbf{x} \leq \delta(p) .$$

Le cas  $p = 3/2$  est dû à Faris, sans la détermination explicite de la constante  $\delta(3/2)$ ; pour  $p = 1$  l'inégalité (46) prend la forme

$$(47) \quad \int (4\pi|\mathbf{x}|)^{-1} (V(\mathbf{x}) - c)_- d\mathbf{x} \leq 1 ,$$

ce qui redonne un critère classique dû à Bargmann, Birman [5] et Schwinger [19].

### 3.5. Nombre de valeurs propres

Au lieu de se demander s'il n'existe aucune valeur propre de  $H = -\Delta + V$  qui soit  $\leq c$ , on peut plus généralement chercher à les compter. Notons  $N_c(V)$  la trace du projecteur spectral de  $H$  relativement à l'intervalle  $]-\infty, c[$ . Lorsque le potentiel  $V$  est invariant par les rotations autour de l'origine, l'opérateur  $H$  est réduit par la décomposition de  $L^2(\mathbb{R}^3)$  comme somme directe des sous-espaces  $\mathbb{D}_\ell \otimes L^2(0, +\infty)$  (voir 2.2); on peut écrire  $N_c(V) = \sum_{\ell=0}^{\infty} N_c(V)_\ell$ , où la multiplicité spectrale  $N_c(V)_\ell$  se réfère au sous-espace  $\mathbb{D}_\ell \otimes L^2(0, +\infty)$ . L'estimation classique est due à Bargmann :

$$(48) \quad N_c(V)_\ell \leq (4\pi)^{-1} \int (V(\underline{x}) - c)_- |\underline{x}|^{-1} d\underline{x}.$$

Avec Birman [5] et Schwinger [19], nous introduirons l'opérateur

$$(49) \quad B_c(V) = |V|^{1/2} (-\Delta - c)^{-1} |V|^{1/2}$$

pour tout nombre réel  $c < 0$ ; il est donné par un noyau intégral de carré intégrable, donc c'est un opérateur de Hilbert-Schmidt. Un calcul immédiat (voir le livre de B. Simon [21] pour les détails) montre que si la fonction  $f$  satisfait à  $Hf = cf$ , alors la fonction  $|V|^{1/2}f$  satisfait à  $B_c(V)g = -g$ . De là, on déduit l'inégalité

$$(50) \quad N_c(V) \leq \text{Tr}(B_c(V)^2).$$

En appliquant le principe usuel du minimax (voir [7], pages 455 à 460), on obtient

$$(51) \quad N_c(V) \leq N_{c/2}(-(-V - c/2)_-),$$

d'où  $N_c(V) \leq \text{Tr}(B_{c/2}(-(-V - c/2)_-)^2)$  en substituant convenablement dans (50). En évaluant le carré de la trace au moyen d'une intégrale double, puis en utilisant l'inégalité de Young, on obtient finalement l'inégalité de Lieb et Thirring [14]

$$(52) \quad N_c(V) \leq |32\pi^2 c|^{-1/2} \int (V(\underline{x}) - c/2)_-^2 d\underline{x}$$

pour  $V \leq 0$  et  $c < 0$ . Si les  $e_j$  sont les valeurs propres strictement négatives de  $H$ , comptées selon leur multiplicité, on obtient le corollaire suivant de (52)

$$(53) \quad \sum_j |e_j| = \int_0^\infty N_{-c}(V) dc \leq (4/15\pi) \int |V|^{5/2} d\underline{x}.$$

Cette dernière estimation joue un rôle crucial dans l'étude de la stabilité de la matière.

§ 4. Stabilité de la matière

De manière générale, une molécule se compose de  $k$  noyaux atomiques, dont nous noterons  $Z_1, \dots, Z_k$  les nombres atomiques (c'est-à-dire le nombre de charges élémentaires positives qu'ils portent) et  $M_1, \dots, M_k$  les masses, et de  $N$  électrons. Supposons les noyaux fixes et notons  $\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_k$  leurs positions; dans notre système d'unités, un électron situé au point  $\underline{x}$  est soumis à un potentiel électrostatique égal à

$$(54) \quad W(\underline{x}) = - \sum_{j=1}^k 2Z_j |\underline{x} - \underline{a}_j|^{-1}.$$

Soient  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N$  les positions des électrons, et soit  $\underline{R}^{3N}$  l'espace euclidien à  $3N$  dimensions formé des points  $(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N)$ . Pour  $1 \leq i \leq N$ , notons  $\Delta_i$  le laplacien dans  $\underline{R}^{3N}$  correspondant aux coordonnées de  $\underline{x}_i$ ; posons

$$(55) \quad H_i = -\Delta_i + W(\underline{x}_i) \quad \text{pour } 1 \leq i \leq N.$$

L'hamiltonien de la molécule est alors décrit par la formule

$$(56) \quad H^{(N)} = H_1 + \dots + H_N + \sum_{i \neq j} |\underline{x}_i - \underline{x}_j|^{-1}.$$

Kato a démontré en 1951 dans [11] que l'opérateur  $H^{(N)}$  est autoadjoint dans  $L^2(\underline{R}^{3N})$  si on lui alloue pour domaine l'espace de Sobolev  $\underline{H}_2(\underline{R}^{3N})$ .

En fait, l'espace  $L^2(\underline{R}^{3N})$  n'est pas l'espace de Hilbert correct où faire agir l'opérateur différentiel  $H^{(N)}$ . Les physiciens ont coutume de dire que les électrons ont le spin  $1/2$  et qu'ils obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Cela signifie qu'il faut faire agir  $H^{(N)}$  sur l'espace de Hilbert  $\underline{E}_N$  formé des fonctions mesurables de la forme  $f(\underline{x}_1, \underline{\sigma}_1; \dots; \underline{x}_N, \underline{\sigma}_N)$  avec  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N$  dans  $\underline{R}^3$  et  $\underline{\sigma}_1, \dots, \underline{\sigma}_N$  dans  $\{1, -1\}$ , qui sont antisymétriques par rapport aux  $N$  paires  $(\underline{x}_i, \underline{\sigma}_i)$  et qui rendent finie la norme

$$(57) \quad ||f||^2 = \sum_{\underline{\sigma}_1, \dots, \underline{\sigma}_N} \int |f(\underline{x}_1, \underline{\sigma}_1; \dots; \underline{x}_N, \underline{\sigma}_N)|^2 d\underline{x}_1 \dots d\underline{x}_N.$$

Il revient au même de dire que  $\underline{E}_N$  est la puissance extérieure d'ordre  $N$  de l'espace de Hilbert  $L^2(\underline{R}^3) \otimes \underline{C}^2$ . Comme  $H^{(N)}$  est invariant par toutes les permutations de  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N$ , il agit de manière naturelle sur  $\underline{E}_N$  et le résultat de Kato cité plus haut entraîne que  $H^{(N)}$  est autoadjoint dans  $\underline{E}_N$ .

La connaissance des nombres  $\sigma(H^{(N)})$  (ils dépendent de  $\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_k$ ) est fondamentale en Chimie, où ils s'interprètent comme potentiel d'ionisation, énergie de dissociation des molécules, énergie des réactions chimiques, etc... Un très grand nombre de travaux a été consacré à la recherche d'approximations numériques de ces nombres

$\sigma(H^{(N)})$  . Pour majorer ces nombres , on utilise l'inégalité évidente

$$(58) \quad \sigma(H^{(N)}) \leq \langle f | H^{(N)} f \rangle$$

pour  $f$  de norme 1 appartenant au domaine de  $H^{(N)}$  ; on connaît un grand nombre d'artifices pour rendre  $\langle f | H^{(N)} f \rangle$  aussi petit que possible par un choix convenable de  $f$  . Mais il est extrêmement difficile d'obtenir des minorations pour  $\sigma(H^{(N)})$  .

Le meilleur résultat connu est dû à Lieb et Thirring [14] , [12] :

$$(59) \quad \sigma(H^{(N)}) \geq -5,56 (N^{1/2} + (Z_1^{7/3} + \dots + Z_k^{7/3})^{1/2})^2 .$$

La constante 5,56 provient de l'intégration numérique d'une équation intégrale non-linéaire , et devrait pouvoir encore être améliorée . Lorsque  $Z_1 = \dots = Z_k = Z$  et que la molécule est électriquement neutre , on a  $N = kZ$  , d'où

$$(60) \quad \sigma(H^{(N)}) \geq -5,56 N (1 + Z^{2/3})^2 .$$

Comme  $Z$  ne dépasse pas en pratique 100 , on voit que  $|\sigma(H^{(N)})|$  est majoré par une quantité de la forme  $CN$  où  $C$  est une constante indépendante de  $N$  . De là , on déduit facilement que le volume occupé par le système à  $N$  électrons est approximativement égal à  $N a_0^3$  où  $a_0$  est le rayon de Bohr qui nous sert d'unité de longueur . Cette dernière conséquence implique la stabilité de la matière . On notera que notre unité d'énergie est le Rydberg ; par suite , la constante 5,56 équivaut à 75,23 électron-volts ; c'est une estimation de l'ordre de grandeur correct par rapport aux énergies mises en jeu dans les liaisons chimiques .

La proportionnalité à  $N$  dans la formule (60) provient de l'utilisation de l'espace de Hilbert  $E_N$  des fonctions antisymétriques . On peut reprendre le calcul de Lieb et Thirring dans le cas des fonctions symétriques dans  $L^2(\mathbb{R}^{3N})$  . Dans le résultat final analogue à (60) , la constante 5,56 est modifiée , mais surtout , il faut remplacer  $N$  par  $N^{5/3}$  . Toutes les conséquences concernant la stabilité de la matière s'effondrent alors .

Pour les démonstrations , nous renverrons aux articles de Lieb [12] et de Lieb et Thirring [14] déjà cités . Mentionnons seulement que l'inégalité (53) et une généralisation de l'inégalité (38) à l'espace de Hilbert  $E_N$  y jouent un rôle dominant .



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] Th. AUBIN - Problèmes isopérimétriques et espaces de Sobolev, C.R. Acad. Sci. Paris, 280(1975), p. 279-281.
- [2] Th. AUBIN - Espaces de Sobolev sur les variétés riemanniennes, Bull. Sci. Math., 100(1976), p. 149-173.
- [3] Th. AUBIN - Equations différentielles non linéaires et problème de Yamabe concernant la courbure scalaire, Journ. Math. Pures et Appl., 55(1976), p. 269-296.
- [4] J.F. BARNES , H.J. BRASCAMP et E.H. LIEB - Lower bound for the ground state energy of the Schrödinger equation using the sharp form of Young's inequality, dans [15] , pages 83 à 90.
- [5] M.S. BIRMAN - Mat. Sbornik, 55(1961), p. 125-174 [Traduction anglaise: The spectrum of singular boundary value problems, Amer. Math. Soc. Translations, Series 2, 53(1966), p. 23-80. ]
- [6] G.A. BLISS - An integral inequality, Journ. London Math. Soc., 5(1930), p. 40-46.
- [7] R. COURANT et D. HILBERT - Methods of mathematical Physics, volume 1, Interscience, 1953.
- [8] F.J. DYSON et A. LENARD - Stability of matter I : Journ. Math. Phys., 8(1967), p. 423-434, et II : ibid., 9(1968), p. 698-711.
- [9] G.H. HARDY , J.E. LITTLEWOOD et G. POLYA - Inequalities, Cambridge University Press, deuxième édition, 1952.
- [10] V. GLASER , A. MARTIN , H. GROSSE et W.E. THIRRING - A family of optimal conditions for the absence of bound states in a potential, dans [15] , pages 169 à 194.
- [11] T. KATO - Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type, Trans. Amer. Math. Soc., 70(1951), p. 195-211.
- [12] E.H. LIEB - The stability of matter, Reviews of Modern Physics, 48(1976), p. 555-569.
- [13] E.H. LIEB et J.L. LEBOWITZ - The constitution of matter : existence of thermodynamics for systems composed of electrons and nuclei, Adv. Math., 9(1972), p. 316-398.
- [14] E.H. LIEB et W.E. THIRRING - Inequalities for the moments of eigenvalues of the Schrödinger Hamiltonian and their relation to Sobolev inequalities, dans [15], pages 169 à 194.
- [15] E.H. LIEB , B. SIMON et A.S. WIGHTMAN (éditeurs) - Studies in Mathematical Physics (Essays in honor of Valentine Bargmann), Princeton University Press, 1976.
- [16] J. MILNOR - Morse theory, Annals of Math. Studies, vol. 51, Princeton University

Press, 1963.

- [17] G.D. MOSTOW - Quasi-conformal mappings in n-space and the rigidity of hyperbolic space forms, Publ. Math. I.H.E.S., 34(1968), p. 53-104.
- [18] G. ROSEN - Minimum value for c in the Sobolev inequality  $||\tilde{\Phi}^3|| \leq c ||\nabla \Phi||^3$ , S.I.A.M. Journ. Appl. Math., 21(1971), p. 30-32.
- [19] J. SCHWINGER - On the bound states of a given potential, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 47(1961), p. 122-129.
- [20] B. SIMON - On the number of bound states of two-body Schrödinger operators -- a review, dans [15], pages 305 à 326.
- [21] B. SIMON - Quantum mechanics for hamiltonians defined by quadratic forms, Princeton University Press, 1971.
- [22] S. SOBOLEV - Sur un théorème d'Analyse Fonctionnelle, Mat. Sbornik, 46(1938), p. 471-496.
- [23] S. SOBOLEV - Sur les équations aux dérivées partielles hyperboliques non-linéaires, Edizioni Cremonese, Roma, 1961.
- [24] E. STEIN - Singular integrals and differentiability properties of functions, Princeton University Press, 1970.