Haïm Brézis

Équations non linéaires du type Thomas-Fermi

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1979, tome 27
« Conférences de : W.O. Amrein, H. Brezis, T. Damour, R. Flume, B. Gaveau et I. Ekeland », , exp. n^{o} 2, p. 31-36

<http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1979__27__31_0>

Equations non linéaires du type Thomas-Fermi

par

Haïm BREZIS

Dépt. de Mathématiques - Université Paris VI

Soit $\rho(x) : \mathbb{R}^3 \to [0,+\infty[$; on considère la fonctionnelle

$$\mathcal{E}(\rho) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{5/3}(x)dx - \int_{\mathbb{R}^3} V(x)\rho(x)dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dxdy ,$$

où $V(x)$ est une fonction donnée (cas particulier important : $V(x)$ est un potentiel de Coulomb $V(x) = \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{|x-a_i|}$ où $m_i > 0$ et $a_i \in \mathbb{R}^3$ sont fixés).

Le problème suivant de minimisation intervient en mécanique quantique :

(1) $$\min_{\rho\in K} \mathcal{E}(\rho)$$

où K est l'ensemble convexe

$$K = \{\rho \in L^1(\mathbb{R}^3) \ ; \ \rho \geq 0 \ \text{p.p. et} \ \int\rho(x)dx = I\}$$

et où $I > 0$ est une constante fixée.

$\mathcal{E}(\rho)$ est appelée la fonctionnelle de Thomas-Fermi. La fonction ρ à déterminer représente une densité d'electrons (ou de Fermions) distribués autour des noyaux positifs de charge m_i situés aux points a_i de l'espace.

La fonctionnelle $\mathcal{E}$ contient 3 termes qui représentent respectivement l'énergie cinétique, l'énergie potentielle d'attraction (interaction des electrons et des noyaux positifs), l'energie potentielle de répulsion (interaction des electrons).

Malgré les apparences, le problème (1) n'est pas un problème banal de minimisation convexe; il n'admet pas toujours une solution. Supposons par exemple que $V \in L^\infty \cap L^1$ de sorte que $\operatorname{Inf}_K \mathcal{E} > -\infty$, et soit ρ_n une suite minimisante. Il est clair que ρ_n est borné dans L^p pour $I \leq p \leq 5/3$ et donc (après extraction d'une sous-suite) $\rho_n \to \bar{\rho}$ faiblement dans L^p, $I < p \leq 5/3$.
Il est aisé de montrer que

$$\mathcal{E}(\bar{\rho}) \leq \underline{\lim}\, \mathcal{E}(\rho_n) = \operatorname{Inf}_K \mathcal{E} .$$

<u>Toutefois</u>, en général $\bar{\rho} \notin K$; on peut seulement affirmer que

$$\int \bar{\rho}(x)\, dx \leq I .$$

Le premier résultat important concernant (1) est dû à E. Lieb - B. Simon.

<u>Théorème 0</u> [3] .
On suppose que $V(x) = \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{|x-a_i|}$ et on pose $I_o = \sum_{i=1}^{k} m_i$.

Alors

(i) Si $0 < I \leq I_o$, le problème (1) admet une solution unique $\bar{\rho}$.

(ii) Si $I > I_o$, le problème (1) n'admet <u>pas</u> de solution

(iii) Si $I < I_o$, la solution de (1) a un support compact.

Nous décrivons maintenant un travail en collaboration avec Ph. Benilan qui généralise le Théorème 0 dans plusieurs directions :

(a) $\rho^{5/3}$ est remplacé par $j(\rho)$ où $j : [0,\infty[\to [0,+\infty[$ est une fonction convexe de classe C^1 telle que $j(0) = j'(0) = 0$.
Par exemple si l'on tient compte d'effets relativistes, il faut remplacer $\rho^{5/3}$ par

$$j(\rho) = \int_0^{\rho^{1/3}} ((1+t^2)^{\frac{1}{2}}-1)\, t^2\, dt$$

(b) Le potentiel de Coulomb est remplacé par une fonction générale. Bien entendu, il est essentiel d'élucider le rôle joué par I_o .

(c) Notre approche est très différente de celle de Lieb et Simon. Au lieu de résoudre (1), on travaille sur l'équation d'Euler-Lagrange déduite de (1). C'est une équation aux dérivées partielles non linéaires. L'avantage est le suivant : considérons par exemple le cas $j(r) = r^p$, $p > 1$ et $V(x) = \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{|x-a_i|}$

- Si $p > \frac{3}{2}$ on peut résoudre (1) et la méthode de [3] s'applique bien (noter que $\frac{5}{3} > \frac{3}{2}$!) .
- Si $\frac{4}{3} < p \leq \frac{3}{2}$ on ne peut pas résoudre (1) car en fait $\operatorname{Inf}_K \mathcal{E} = -\infty$. Par contre l'équation d'Euler-Lagrange admet une solution.

Etant donné $\rho \in L^1(\mathbb{R}^3)$, on pose :

$$B\rho = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\cdot|} * \rho = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho(y)}{|x-y|} dy = (-\Delta)^{-1} \rho .$$

$$J(\rho) = \int_{\mathbb{R}^3} [j(\rho(x)) - V(x)\rho(x)]dx$$

$$D(J) = \{\rho \in L^1(\mathbb{R}^3), \rho \geq 0 \text{ p.p. et } j(\rho) - V\rho \in L^1(\mathbb{R}^3)\}$$

où $V(x)$ est une fonction mesurable,

$$H(\rho) = \tfrac{1}{2}\int \rho . B\rho \, dx = \frac{1}{8\pi} \iint \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dx\, dy ,$$

avec

$$D(H) = \{\rho \in L^1(\mathbb{R}^3) , \rho \geq 0 \text{ et } \rho . B\rho \in L^1\} .$$

Enfin

$$\mathcal{E}(\rho) = J(\rho) + K(\rho)$$

avec $D(\mathcal{E}) = D(J) \cap D(H)$.

Les résultats principaux sont les suivants (nous renvoyons à [1] pour les démonstrations).

Théorème 1 : On suppose que $\overline{\rho} \in D(\mathcal{E}) \cap K$ vérifie

(2) $\mathcal{E}(\overline{\rho}) \leq \mathcal{E}(\rho) \quad \forall \rho \in D(\mathcal{E}) \cap K$.

Alors il existe une constante $\lambda \in \mathbb{R}$ telle que

(3) $$j'(\bar{\rho}) - V + B\bar{\rho} = -\lambda \quad \text{p.p. sur} \quad [\bar{\rho} > 0]$$
$$- V + B\bar{\rho} \geq -\lambda \quad \text{p.p. sur} \quad [\bar{\rho} = 0]$$

Inversement on suppose que

(4) $\exists C$ tel que $j^*(V(x)+C) \in L^1(R^3)$,

alors pour $\bar{\rho} \in K$, (3) implique (2) .
(j^* désigne la fonction convexe conjuguée de j) .

Théorème 2 : On suppose

(5) $V \in \frac{1}{|\cdot|} * L^1$ (i.e. $\Delta V \in L^1$ et $V(\infty) = 0$)

(6) $V > 0$ sur un ensemble de mesure > 0

Alors

A) Il existe $0 < I_o < \infty$ (qui dépend de j et de V) tel que

a) si $0 < I \leq I_o$, il existe une solution unique $\bar{\rho} \in K$ et $\lambda \geq 0$ de (3)

b) si $I > I_o$ il n'existe aucune solution $\bar{\rho} \in K$ de (3)

B) Si $I < I_o$ et si $V(x) \to 0$ quand $|x| \to \infty$ alors la solution $\bar{\rho}$ de (3) a un support compact.

C) Si (par exemple) $j(r) = r^p$ avec $p \geq 4/3$ alors $\int -\Delta V \leq I_o \leq \int (-\Delta V)^+$
[en particulier si $-\Delta V \geq 0$ alors $I_o = \int(-\Delta V)$].

D) Si on affaiblit l'hypothèse (5) et on suppose que

(7) $V \in \frac{1}{|\cdot|} * \mathcal{M}$ (i.e. $\Delta V \in \mathcal{M}$ et $V(\infty) = 0$)

où $\mathcal{M}$ désigne l'espace des mesures bornées sur R^3 , et si on suppose que $j(r) = r^p$ avec $p > 4/3$ alors A), B) et C) sont encore valables.

Remarques :

1) La constante λ qui apparaît dans (3) est un multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte $\int \rho = I$; $-\lambda$ est appelé le potentiel chimique.

2) le théorème 1 montre qu'une solution variationnelle (i.e. une solution

de (2)) est <u>toujours</u> solution de l'équation d'Euler-Lagrange (3). La réciproque est vraie seulement sous l'hypothèse restrictive (4) qui garantit essentiellement que $\operatorname{Inf}_K \mathcal{E} > -\infty$. Par exemple si $j(r) = r^p$ et $V(x) = \Sigma \frac{m_i}{|x-a_i|}$ alors (4) est équivalent à $p > 3/2$.

L'hypothèse (4) n'est <u>pas</u> vérifiée si $V(x)$ est un potentiel coulombien pour le problème de Thomas-Fermi relativiste.

3) Insistons sur le fait que A) et B) ne requièrent aucune hypothèse sur j. Lorsque $V(x)$ est un potentiel coulombien on a $-\Delta V = 4\pi \Sigma m_i \ \delta(x-a_i)$ et il est donc nécessaire d'utiliser D).
Malheureusement si $j(r) = r^{4/3}$ (et dans le cadre relativiste) on ne peut appliquer D). En fait on peut alors prouver que l'équation d'Euler-Lagrange (3) n'admet <u>aucune</u> solution (et par ailleurs $\operatorname{Inf}_K \mathcal{E} = -\infty$).
Si l'on souhaite "à tout prix" obtenir une solution il est indispensable de régulariser "un peu" V.

4) Pour résoudre (3) on introduit l'inconnue $u = V - B\bar{\rho}$. On est alors conduit à écrire (3) sous la forme :

$$(8) \qquad \begin{cases} -\Delta u + \gamma(u-\lambda) = -\Delta V \\ u(\infty) = 0 \\ \int \gamma(u-\lambda) = I \end{cases}$$

où
$$\gamma(t) = \begin{cases} (j')^{-1}(t) & \text{pour } t > 0 \\ 0 & \text{pour } t \leq 0 \end{cases}$$

($(j')^{-1}$ est la fonction réciproque de j').
Les inconnues sont u <u>et</u> λ. La stratégie est la suivante :
On <u>fixe</u> λ, et on résoud de manière unique :

$$\begin{aligned} - \Delta u_\lambda + \gamma(u_\lambda - \lambda) &= -\Delta V \\ u_\lambda(\infty) &= 0 \end{aligned}$$

(ceci est possible grâce à un résultat de [2]).

On introduit ensuite la fonction $I(\lambda) = \int \gamma(u_\lambda - \lambda)$ et on cherche λ tel que $I(\lambda) = I$ (I est donné). On vérifie à l'aide du principe du maximum que la fonction $I(\lambda)$ est décroissante. Il est alors aisé de comprendre le rôle de I_o .

REFERENCES

[1] Ph. Benilan - H. Brezis : papier détaillé sur Thomas-Fermi à paraître.

[2] Ph. Benilan - H. Brezis - M. Crandall : A semilinear equation in L^1 , Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa 2 (1975) p. 523-555.

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