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>

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

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

où $\varphi(\underline{\underline{x}},t)$ est fonction du point $\underline{\underline{x}}$ de l'espace euclidien $\underline{\underline{R}}^3$ et du temps t , $\hbar$ est la constante de Planck et m la masse d'une particule se mouvant dans le potentiel $V(\underline{\underline{x}})$. Les valeurs propres de l'opérateur <u>hamiltonien</u> $H = -(\hbar^2/2m).\Delta + V$ sont les <u>niveaux d'énergie</u> de la particule . De manière générale , on appelle <u>état lié</u> 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) <u>prouver</u> (sous des hypothèses convenables sur V) <u>que le spectre de l'opérateur H est borné inférieurement</u> ;

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

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 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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 , $M \cong 4m_p$ et $Z = 2$ pour l'hélium ionisé 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 $V(\underline{\underline{x}}) = - Ze^2|\underline{\underline{x}}|^{-1}$, où $|\underline{\underline{x}}|$ est la longueur d'un vecteur $\underline{\underline{x}}$ dans l'espace euclidien $\underline{\underline{R}}^3$.

L'opérateur hamiltonien s'écrit alors sous la forme

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

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

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

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

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 $a_o = 5{,}32053 \cdot 10^{-9}$ 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

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

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

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

Les valeurs propres de H_ℓ 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

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

Comme $\underline{D_\ell}$ est de dimension $2\ell + 1$, la multiplicité de $-Z^2/n^2$ comme valeur propre de H est égale à $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$. De plus , le spectre continu de H_ℓ 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 Δ . La transformée de Fourier d'une fonction f appartenant à $L^2(\underline{\underline{R}}^3)$ est définie par

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

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

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

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

On dit qu'une fonction V sur $\underline{\underline{R}}^3$ 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 $V(\underline{\underline{x}}) = -2Z|\underline{\underline{x}}|^{-1}$. 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 ≥ 4) ; si V satisfait aux conditions de Kato , alors Vf appartient à $\underline{H}_o$ pour toute fonction f dans $\underline{H}_2$. De plus , Kato a montré dans [11] que l'opérateur $H : \underline{H}_2 \longrightarrow \underline{H}_o$ défini par $Hf = -\Delta f + Vf$ est auto-adjoint dans $\underline{H}_o$.

Pour traîter 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 $\underline{\underline{R}}$ définie par $m_f(A) = \langle f \,|m(A).f \rangle$ pour toute partie mesurable A de $\underline{\underline{R}}$. 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

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

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

$$q_T[f] = \langle f \mid Tf \rangle \qquad \text{pour } f \text{ dans } \underline{D}_T . \tag{14}$$

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 $\underline{H}_o$ telles que l'intégrale $\int |V| \, |f|^2 \, d\underline{\underline{x}}$ soit finie . De plus , on a

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

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

Dans la formule (15) , ∇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 $\underline{H}_o$ 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) <u>l'espace</u> $\underline{H}_1 = \underline{Q}_{-\Delta}$ <u>est contenu dans</u> $\underline{Q}_V$;

b) <u>il existe un nombre réel</u> c <u>tel que l'on ait l'inégalité</u>

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

<u>pour toute fonction</u> f <u>dans</u> $\underline{\underline{H}}_1$.

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

(18) $$< f|g >_H = \int \overline{\nabla f}.\nabla g \, d\underline{\underline{x}} + \int V\bar{f}g \, d\underline{\underline{x}} \quad ,$$

d'où

(19) $$< f|f >_H = q_{-\Delta}[f] + q_V[f] \qquad \text{pour toute fonction } f \text{ dans } \underline{\underline{H}}_1 .$$

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

(20) $$< g|f >_H = \int \bar{g}f_1 \, d\underline{\underline{x}} \qquad \text{pour toute fonction } g \text{ dans } \underline{\underline{H}}_1 .$$

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

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

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 $\underline{\underline{D}}_H$ et l'on a $Hf = -\Delta f + Vf$ pour une telle fonction f . Lorsque V satisfait aux hypothèses de Kato , on a $\underline{\underline{D}}_H = \underline{\underline{H}}_2$ et $Hf = -\Delta f + Vf$ pour toute fonction f dans $\underline{\underline{H}}_2$, de sorte qu'on retrouve pour H l'opérateur défini par Kato .

2.4. <u>Quelques estimations élémentaires</u>

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

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

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

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

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

d'où

$$|\nabla(f\Phi)|^2 = |f|^2\,|\nabla\Phi|^2 + \Phi\nabla\Phi\cdot\nabla(|f|^2) + \Phi^2\,|\nabla f|^2$$
$$= \nabla\cdot(\Phi\,|f|^2\nabla\Phi) - |f|^2\,\Phi\,\Delta\Phi + \Phi^2\,|\nabla f|^2\ ;$$

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

$$(23)\qquad \int\left\{|\nabla(f\Phi)|^2 + V|f\Phi|^2\right\}d\underline{\underline{x}} = \int\left\{|\nabla f|^2 + (V - V_1)\,|f|^2\right\}\rho\,d\underline{\underline{x}}\ .$$

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

Supposons d'abord que Φ 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 <u>est donc la borne inférieure</u> $\sigma(H)$ <u>du spectre de</u> H . Normalisons Φ par $\int |\Phi|^2\,d\underline{\underline{x}} = 1$. Alors la fonction Φ est l'état fondamental pour l'hamiltonien H , et la mesure $\rho\,d\underline{\underline{x}}$ sur $\underline{\underline{R}}^3$ 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[1] , pour $V(\underline{\underline{x}}) = -2Z|\underline{\underline{x}}|^{-1}$, on pourra prendre $\Phi(\underline{\underline{x}}) = e^{-Z|\underline{\underline{x}}|}$ et $c = -Z^2$; par suite $-Z^2$ est la borne inférieure du spectre de $-\Delta - 2Z|\underline{\underline{x}}|^{-1}$, ce que nous savions déjà par les résultats plus précis rappelés au n° 2.2 .

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

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

(voir Courant et Hilbert , page 446 pour ce calcul) . Dans le cas coulombien $V(\underline{\underline{x}}) = -2Z|\underline{\underline{x}}|^{-1}$, on obtient ainsi l'estimation $\sigma(H) \geq -4Z^2$, que l'on comparera à la valeur exacte $\sigma(H) = -Z^2$.

§ 3. <u>Inégalités en tous genres</u>

3.1. <u>Réarrangement sphérique</u>

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

---

[1] La fonction Φ n'est de classe C^∞ qu'en dehors de l'origine . Mais comme $C_c^\infty(\underline{\underline{R}}^n - \{0\})$ 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 $\underline{\underline{R}}^n$;

b) il existe une fonction décroissante $u : [0, +\infty[\longrightarrow [0, +\infty[$ telle que $f_S(\underline{\underline{x}}) = u(|\underline{\underline{x}}|)$ pour tout $\underline{\underline{x}}$ dans $\underline{\underline{R}}^n$;

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 <u>réarrangement sphérique</u> (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) $$\int f(\underline{\underline{x}})\, u(|\underline{\underline{x}}|)\, d\underline{\underline{x}} \leq \int f_S(\underline{\underline{x}})\, u(|\underline{\underline{x}}|)\, d\underline{\underline{x}}$$

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

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

Soient $\underline{\underline{x}}_1, \ldots, \underline{\underline{x}}_r$ les points de K où s'annule ∇f , et soient $c_1 = f(\underline{\underline{x}}_1), \ldots, c_r = f(\underline{\underline{x}}_r)$ 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

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

On voit facilement que la fonction f_S est de classe C^∞ en tout point $\underline{\underline{x}}$ tel que $f_S(\underline{\underline{x}})$ 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^∞ en c , l'ensemble $\{f = c\}$ est une sous-variété de dimension $n-1$ de $\underline{\underline{R}}^n$, et les dérivées des fonctions J , J_S et U se calculent par les formules

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

---

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

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

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

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

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

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

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

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 $c_1,\ldots,c_r$. Par intégration sur c , on en déduit l'inégalité (26) .

3.2. Une inégalité de Sobolev précisée

L'espace de Sobolev $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$ se compose des fonctions absolument continues sur $\underline{\underline{R}}$, qui sont de carré intégrable ainsi que leur dérivée . C'est un espace de Hilbert , dont la norme est donnée par

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

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 $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}}) \subset L^k(\underline{\underline{R}})$ et la norme de l'inclusion de $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$ dans $L^k(\underline{\underline{R}})$ est le nombre N_k défini par

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

Soit $c > 0$. On note $\underline{H}(c)$ le sous-espace fermé de $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$ formé des fonctions nulles en dehors de l'intervalle $[-c,c]$. Pour toute fonction u dans $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$, on a $|u(t) - u(t')| \leq ||u||.|t - t'|^{1/2}$ quels que soient t et t' dans $\underline{\underline{R}}$. De plus , on a $||u|| \leq 1$ si et seulement si l'on a

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

pour toute fonction φ de classe C^2 à support compact . D'après le théorème d'Ascoli, l'intersection $B(c)$ de la boule unité de $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$ avec $\underline{H}(c)$ est donc compacte pour la convergence uniforme . Notons $||u||_k$ la norme dans $L^k(\underline{\underline{R}})$ et posons $N(c) = \sup_{u\in B(c)} ||u||_k$. Comme les fonctions à support compact sont denses dans $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}})$, on a

$$N_k = \lim_{c\to\infty} N(c) \qquad \text{(limite croissante)} . \tag{32}$$

Comme la fonctionnelle $u \longmapsto ||u||_k$ 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 $J : u \longmapsto ||u||/||u||_k$ 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

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

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 Γ_a dans $\underline{\underline{R}}^2$ d'équation

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

homéomorphe à un cercle , et la période $\pi(a) = \int_{\Gamma_a} dx/y$. L'application π 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 $u_c(x) = u(x;\pi^{-1}($

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

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

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

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

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 GMGT , est valable pour $1 < q \leq 3$ et se formule ainsi

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

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

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

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

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

avec $c = 3.(\pi/2)^{4/3} = 5,477904090\ldots$ 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 $C_c^\infty(\underline{\underline{R}}^3)$ est dense dans l'espace de Sobolev $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}}^3)$, et il suffit donc de prouver GMGT pour une fonction f appartenant à $C_c^\infty(\underline{\underline{R}}^3)$.

b) Un lemme classique de théorie de Morse (voir Milnor [16,page 37]) montre que toute fonction de $C_c^\infty(\underline{\underline{R}}^3)$ est limite dans $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}}^3)$ d'une suite de fonctions satisfaisant aux conditions du théorème 3.1 .

c) Faisons l'hypothèse $1 < q \leq 3$; comme la fonction $t \longmapsto t^{q-3}$ sur $[0, +\infty[$ est décroissante , l'inégalité (25) et le théorème 3.1 montrent qu'il suffit de prouver GMGT lorsque $f = f_S$. Ecrivons alors f sous la forme $f(\underline{\underline{x}}) = |\underline{\underline{x}}|^{-1/2} v(|\underline{\underline{x}}|)$. On transforme l'intégrale $\int |\nabla f|^2 \, d\underline{\underline{x}}$ 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

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

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

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

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 - <u>Supposons que la multiplication par</u> $|V|^{1/2}$ <u>applique l'espace de Sobolev</u> $\underline{H}_1(\underline{\underline{R}}^3)$ <u>dans</u> $\underline{H}_0(\underline{\underline{R}}^3) = L^2(\underline{\underline{R}}^3)$. <u>On a alors</u> $\sigma(H) \geq c$ <u>pour tout nombre réel</u> c <u>pour lequel il existe</u> $p \geq 3/2$ <u>avec</u>

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

Par exemple , lorsque $V = -2Z|\underline{\underline{x}}|^{-1}$, 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) $$||f||_p \leq K(n,q) \, ||\nabla f||_q \quad ;$$

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

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

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

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

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

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,λ,p,q elle s'énonce ainsi

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

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 $\int e^{-a(V-c)} \, d\underline{\underline{x}} \leq e^3(\pi a)^{3/2}$, 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) $$\int |\underline{\underline{x}}|^{2p-3} \, (V(\underline{\underline{x}}) - c)_-^p \, d\underline{\underline{x}} \leq \delta(p) \quad .$$

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

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 $L^2(\underline{\underline{R}}^3)$ comme somme directe des sous-espaces $\underline{D_\ell} \otimes L^2(0, +\infty)$ (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 $\underline{D_\ell} \otimes L^2(0, +\infty)$. L'estimation classique est due à Bargmann :

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

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

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

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

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

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

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

d'où $N_c(V) \leq \operatorname{Tr}(B_{c/2}(-(V-c/2)_-)^2)$ 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]

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

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)

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

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 $\underline{\underline{a}}_1,\dots,\underline{\underline{a}}_k$ leurs positions ; dans notre système d'unités, un électron situé au point $\underline{\underline{x}}$ est soumis à un potentiel électrostatique égal à

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

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

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

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

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

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

En fait, l'espace $L^2(\underline{\underline{R}}^{3N})$ 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 $\underline{\underline{E}}_N$ formé des fonctions mesurables de la forme $f(\underline{\underline{x}}_1,\sigma_1;\dots;\underline{\underline{x}}_N,\sigma_N)$ avec $\underline{\underline{x}}_1,\dots,\underline{\underline{x}}_N$ dans $\underline{\underline{R}}^3$ et $\sigma_1,\dots,\sigma_N$ dans $\{1,-1\}$, qui sont <u>antisymétriques</u> par rapport aux N paires $(\underline{\underline{x}}_i,\sigma_i)$ et qui rendent finie la norme

(57)
$$||f||^2 = \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_N} \int |f(\underline{\underline{x}}_1,\sigma_1;\dots;\underline{\underline{x}}_N,\sigma_N)|^2 \, d\underline{\underline{x}}_1\dots d\underline{\underline{x}}_N .$$

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

La connaissance des nombres $\sigma(H^{(N)})$ (ils dépendent de $\underline{\underline{a}}_1,\dots,\underline{\underline{a}}_k$) 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 <u>majorer</u> ces nombres , on utilise l'inégalité évidente

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

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 <u>minorations</u> pour $\sigma(H^{(N)})$.

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

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

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

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 Na_o^3 où a_o 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 proportionalité à N dans la formule (60) provient de l'utilisation de l'espace de Hilbert $\underline{E}_N$ des fonctions antisymétriques . On peut reprendre le calcul de Lieb et Thirring dans le cas des fonctions symétriques dans $L^2(\underline{R}^{3N})$. 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 $\underline{E}_N$ 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 $||\Phi^3|| \leq c\ ||\nabla\Phi||^3$, 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.