

RAIRO

MODÉLISATION MATHÉMATIQUE ET ANALYSE NUMÉRIQUE

JEAN-FRANÇOIS LÉON

Existence et unicité de la solution positive de l'équation TFW sans répulsion électronique

RAIRO – Modélisation mathématique et analyse numérique,
tome 21, n° 4 (1987), p. 641-654.

http://www.numdam.org/item?id=M2AN_1987__21_4_641_0

© AFCET, 1987, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « RAIRO – Modélisation mathématique et analyse numérique » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/legal.php>). 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/>



EXISTENCE ET UNICITÉ DE LA SOLUTION POSITIVE DE L'ÉQUATION TFW SANS RÉPULSION ÉLECTRONIQUE (*)

par Jean-François LÉON ⁽¹⁾

Communiqué par Pierre-Louis LIONS ⁽¹⁾

Résumé. — Nous montrons ici l'existence et l'unicité de la solution positive d'une équation quasi linéaire elliptique obtenue à partir de la généralisation du modèle Thomas-Fermi-Von Weisacker sans répulsion électronique. Nous étudions ensuite le comportement asymptotique de cette solution au voisinage de l'infini.

Abstract. — We show an existence and unicity result for a quasi linear elliptic equation derived from the Thomas-Fermi-Von Weisacker model without electronic repulsion and we study the asymptotic behaviour of our solution when $|x| \rightarrow \infty$.

1. INTRODUCTION

On considère une équation semi-linéaire elliptique — TFW dans ce qui suit — obtenue à partir du modèle atomique de Thomas-Fermi-Von Weisacker dans lequel on a négligé le terme de répulsion électronique. Ce modèle fait partie des différents modèles tirés de l'approximation semi-classique et se ramène en pratique à l'étude de la fonctionnelle énergie :

$$E(\theta) = \int_{R^3} |\nabla\theta|^2 + 1/p \int_{R^3} |\theta|^{2p} - \int_{R^3} |\theta|^2/|x| .$$

Le cas physiquement intéressant correspond à $p = 5/3$. Ces derniers modèles jouent un rôle dans l'étude de la matière condensée et dans l'étude

(*) Reçu en octobre 1986.

L'auteur tient à remercier le Pr P. L. Lions pour les fructueuses discussions qu'il a eues avec lui sur ce sujet.

⁽¹⁾ Service de Physique Atomique des plasmas, Centre d'études de Limeil, BP 27, 94190 Villeneuve Saint Georges.

des plasmas, notamment pour le calcul d'équations d'états. Une littérature très importante existe sur ces sujets. Nous renvoyons à Landau et Lifchitz [5] et Baumgartner [2] pour la dérivation des modèles Thomas-Fermi à partir de la mécanique quantique.

Une présentation détaillée des différents modèles ainsi qu'un énoncé de leurs principales propriétés se trouvent dans Lieb [6].

Précisons toutefois deux points sur les limites de ce modèle :

— Le terme de répulsion électronique qui est ici négligé est de la forme :

$$1/2 \left(\iint (\theta^2(x) \theta^2(y) / |x - y|) dx dy \right).$$

— Le terme $\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\theta|^2$ est le terme correctif de Von Weisacker. Il n'y a aucune raison pour que ce terme soit prépondérant par rapport au terme de répulsion électronique. On montre en effet (voir Lieb [6]), que si Z est la charge du noyau atomique, ces deux termes sont en $O(Z^{-2/3})$ pour $Z \rightarrow \infty$ par rapport au terme de Thomas-Fermi. Ce modèle ne paraît donc pas justifié si l'on désire en tirer des informations quantitatives. Néanmoins si l'on veut étudier de manière qualitative le comportement de la matière atomique, ce modèle apparaît comme plus plausible que Thomas-Fermi puisque, à l'inverse de ce dernier, il permet par exemple la création de molécule. Nous renvoyons encore à Lieb [6] pour une revue de ces propriétés.

Le problème que nous considérons ici est le suivant :

$$\begin{aligned} -\Delta\varphi + |\varphi|^{2p-2}\varphi &= \varphi/|x| \\ \varphi &\geq 0 \\ \varphi &\in L_{loc}^{2p-1}(\mathbb{R}^3). \end{aligned} \quad (\text{TFW})$$

Il s'agit d'une extension du modèle Thomas-Fermi-Von Weisacker qui a été proposée par Lieb [7]. Nous nous intéressons ici aux solutions positives de cette équation. Dans un article ultérieur nous étudierons des solutions plus générales pour TFW en cherchant les points critiques de certaines fonctionnelles associées à l'équation TFW dans l'esprit de Ambrosetti-Rabinowitz [1], Berestycki-Lions [4] et Lions [8].

2. LE RÉSULTAT PRINCIPAL

THÉORÈME : $\forall p > 1$, (TFW) admet une unique solution φ strictement positive. De plus, cette solution vérifie les propriétés suivantes :

— Elle est à symétrie sphérique.

- Elle est continue sur \mathbb{R}^3 et analytique sur $\mathbb{R}^3 - \{0\}$.
- Au voisinage de $+\infty$ la solution vérifie :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) |r|^{1/(2p-2)} = 1.$$

Remarques

1. Dans [7], Lieb démontre le théorème 1 pour $3/2 < p < 2$.
2. Pour (TFW) posée dans R^n , $n \geq 3$, le théorème est encore vrai, la démonstration se transposant littéralement.

Plan de la démonstration : Le théorème va être démontré en plusieurs étapes. La stricte positivité, la continuité et l'analyticit  des solutions de TFW s'obtiennent par des arguments standards, voir par exemple Lieb [7].

1. Dans un premier temps, nous construisons une solution non triviale de TFW :

Si $p \geq \frac{3}{2}$ nous tronquons le probl me initial pour le r soudre dans une boule de rayon R par une m thode variationnelle directe. Puis nous faisons tendre R vers l'infini et nous montrons que notre suite de solutions tend vers une solution de (TFW).

Pour $p < \frac{3}{2}$, contrairement au cas pr c dent, nous pouvons d finir de mani re commode un probl me de minimisation global dont la r solution nous donne une solution non triviale de (TFW).

2. Nous montrons qu'il existe une solution de TFW qui minore toute autre solution de TFW et qui est   sym trie sph rique. Cette solution est dans tous les cas, obtenue comme limite des solutions des probl mes variationnels associ s   l' quation de TFW que l'on tronque pour les r soudre dans une boule de rayon R variable.

3. La propri t  asymptotique  nonc e dans le th or me est alors  tablie pour toute solution de TFW en utilisant des techniques de sur-solutions.

4. L'unicit  est enfin obtenue en comparant une solution de TFW   la plus petite solution de TFW et en utilisant les techniques de sur-solutions ainsi que les r sultats du point 3 pour conclure.

Remarque : Les solutions que donnent les m thodes du point 1 sont   sym trie sph rique, comme cela a  t  annonc  dans le th or me, mais cette propri t  de la solution n'intervient pas dans les constructions du point 1. On s'en persuade facilement en remarquant que la suite obtenue en prenant les sym tris es de Schwarz d'une suite minimisante est encore une suite minimisante.

3. PREUVE DU THÉORÈME 1

Avant toute chose, nous énonçons un lemme fondamental, variante de résultats classiques dont nous détaillons la preuve en appendice.

Dans ce qui suit Ω désigne un ouvert borné, u et v sont supposées continues et on pose $L(\varphi) = -\Delta\varphi + |\varphi|^{2p-2}\varphi - \varphi/|x|$.

LEMME 1 : Si u et v sont positives et continues sur Ω et si $u \leq v$ sur $\partial\Omega$, $L(u) \leq 0 \leq L(v)$ dans $D'(\Omega)$ alors $u \leq v$ sur Ω .

Preuve : Voir l'appendice. ■

3.1. Résultats d'existence

A. $p \geq 3/2$.

PROPOSITION 1.1 : Soit $R > 0$. Alors, il existe $\psi_R > 0$ unique solution du problème :

$$(P_R) \quad \begin{aligned} &-\Delta\varphi + |\varphi|^{2p-2}\varphi = \varphi/|x| \\ &\varphi \geq 0 \\ &\varphi \in H_0^1(B_R) \cap L^{2p}(B_R). \end{aligned}$$

Et donc en particulier, cette solution est à symétrie sphérique.

Preuve : Considérons l'énergie associée au problème P_R :

$$E_R(\varphi) = \int_{B_R} |\nabla\varphi|^2 + 1/p \int_{B_R} |\varphi|^{2p} - \int_{B_R} |\varphi|^2/|x|.$$

$E_R(\varphi)$ est bornée inférieurement et $\forall K$, $(\varphi, E_R(\varphi) \leq K)$ est bornée dans $H_0^1(B_R)$. La preuve de cette assertion est identique à celle du lemme 1 que nous détaillons au point B (valable pour tout p car on travaille ici dans des bornés).

Soit u_n une suite minimisante pour $E_R(\varphi)$. On peut supposer que u_n est positive car $E_R(|\varphi|) \leq E_R(\varphi)$. La suite u_n est bornée dans $H_0^1(B_R)$; on en extrait une sous-suite $u_n \rightarrow \varphi$ faiblement dans $H_0^1(B_R)$.

On obtient avec φ un minimum pour $E_R(\varphi)$, car on a :

$$\begin{aligned} \|\nabla\varphi\|_2 &\leq \liminf \|\nabla u_n\|_2 \\ \|\varphi\|_{2p} &\leq \liminf \|u_n\|_{2p} \\ \int_{R^3} \varphi^2/|x| &= \lim \int_{R^3} u_n^2/|x|. \end{aligned}$$

Les deux inégalités sont classiques. L'égalité est une application directe du lemme 1.7 établi plus bas. On notera φ_R le minimum ainsi obtenu. Il s'agit bien là d'une solution de P_R car la fonctionnelle E_R est dans $C^1(H_0^1(B_R) \cap L^{2p}(B_R))$.

Soient u et v deux solutions positives de P_R , en appliquant deux fois le lemme 1, on en déduit $u = v$ ce qui assure l'unicité de φ_R . ■

Nous allons maintenant étudier la suite des φ_R . Commençons par un résultat qui nous permet de comparer deux éléments de la suite.

LEMME 1.2 : Si $R \leq R'$ alors $\varphi_R(x) \leq \varphi_{R'}(x) \quad \forall x \in B_R$.

Preuve : La restriction de $\varphi_{R'}(x)$ à B_R est sur-solution du problème P_R . Le lemme 1 s'applique donc et donne le résultat annoncé. ■

LEMME 1.3 : $\forall R > 0 \quad \forall x \in B_R, \varphi_R(x) \leq |x|^{-1/(2p-2)}$.

Cette majoration essentielle pour établir l'existence de la solution dans le cas $p \geq 3/2$, peut se déduire facilement d'un résultat de Lieb [7]. Néanmoins, remarquant que la restriction à B_R de $|x|^{-1/(2p-2)}$ est une sur-solution pour le problème P_R , on récupère la majoration annoncée comme conséquence du lemme 1. ■

LEMME 1.4 : Il existe $v : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ continue, à symétrie sphérique, à support compact et tel que $E_R(v) < 0$.

Preuve : On a $E_R(\lambda\varphi) = \lambda^2 \int_{B_R} (|\nabla\varphi|^2 - \varphi^2/|x|) + \lambda^{2p} \int_{B_R} |\varphi|^{2p}$. Or il est classique qu'il existe φ tel que $\int_{B_R} (|\nabla\varphi|^2 - \varphi^2/|x|) \leq 0$. En prenant λ suffisamment petit on a bien $E_R(\lambda\varphi) < 0$. ■

PROPOSITION 1.5 : $\varphi(x) = \lim_{R \rightarrow +\infty} \varphi_R(x)$ est une solution strictement positive de (TFW).

Grâce au lemme 1.4 nous savons que $\varphi_R(x) > 0$. D'autre part, $R \rightarrow \varphi_R(x)$ constitue une suite croissante (lemme 1.2) et majorée, (lemme 1.3) pour tout $x \neq 0$ donc $\exists \varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ tel que $\varphi(x) = \lim_{R \rightarrow +\infty} \varphi_R(x)$ pp et

$\varphi(x) > 0$ pp.

De plus, φ est solution de (TFW). En effet, soit $\eta \in D(\mathbb{R}^3)$; $\exists R_0 > 0 \quad \forall R \geq R_0, \text{supp } \eta \subset B_R$. Pour $R \geq R_0$, on a alors au sens des distributions :

$$- \langle \Delta\varphi_R, \eta \rangle + \langle |\varphi_R|^{2p-2} \varphi_R, \eta \rangle - \langle \varphi_R/|x|, \eta \rangle = 0.$$

Regardons comment les différents termes de cette égalité se comportent quand on fait tendre R vers l'infini.

La théorie usuelle des distributions assure la convergence des deux termes linéaires dans tous les cas. Pour le terme non linéaire, il vient :

$$\langle |\varphi_R|^{2p-2} \varphi_R, \eta \rangle = \int_{B_R} \varphi_R^{2p-1} \eta \rightarrow \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{2p-1} \eta$$

car

$$\begin{aligned} \varphi_R^{2p-1} \eta &\rightarrow \varphi^{2p-1} \eta \text{ pp et} \\ \varphi_R^{2p-1} |\eta| &\leq |\eta| (V_1^{R_0})^{(2p-1)/(2p-2)} \in L^1(\mathbb{R}^3) \text{ pour } p > 5/4. \end{aligned}$$

Autrement dit, φ est solution de (TFW), de plus φ vérifie l'inégalité : $0 < \varphi(x) \leq |x|^{-1/(2p-2)}$ pp.

On a pour φ les estimations suivantes :

$$\varphi \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3) \text{ et } \nabla \varphi \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3).$$

La première appartenance est immédiate à cause de la majoration de φ par une fonction elle-même dans $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$. Soit $\eta \in D(\mathbb{R}^3)$ et R_0 tel que $\text{supp } \eta \subset B_{R_0}$.

$$\begin{aligned} R \geq R_0 \quad |\langle \nabla \varphi, \nabla \eta \rangle| &= |\langle \Delta \varphi, \eta \rangle| \leq \left| \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{2p-1} \eta \right| + \left| \int_{\mathbb{R}^3} \varphi \eta / |x| \right| = \\ &= \lim_{R \rightarrow +\infty} \left| \int_{B_R} \varphi_R^{2p-1} \eta \right| + \left| \int_{B_R} \varphi_R \eta / |x| \right| \\ &\leq 2 \left\| V_1^{R_0(1-2p)/(2p-2)} \right\|_{6/5} \|\eta\|_6 \leq K \|\nabla \eta\|_2. \end{aligned}$$

L'inégalité ci-dessus est obtenue par l'inégalité de Sobolev en remarquant que $\left\| V_1^{R_0(1-2p)/(2p-2)} \right\|_{6/5} < \infty$ dès que $p > 4/3$. Donc on a bien $\nabla \varphi \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$. La fonction $V_1^{R_0}$ étant décrite au point B.

La solution φ est donc continue sur \mathbb{R}^3 et analytique sur $\mathbb{R}^3 - \{0\}$. Ce que l'on obtient par des arguments standards que l'on peut trouver explicités dans Lieb [7]. ■

B. $1 < p < 3/2$

Considérons la fonctionnelle énergie :

$$E(\theta) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \theta|^2 + 1/p \int_{\mathbb{R}^3} |\theta|^{2p} - \int_{\mathbb{R}^3} |\theta|^2 / |x|$$

avec $\theta \in X = \{\psi \in L^{2p}(\mathbb{R}^3), \nabla \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$. Il est clair que X équipé de la norme $\|\psi\|_x = \|\psi\|_{2p} + \|\nabla \psi\|_2$ est un Banach. De plus, $E \in C^1(X, \mathbb{R})$.

LEMME 1.6 : E est bornée inférieurement sur X ; de plus $\forall K \in \mathbb{R}$ $\{\psi \in X, E(\psi) \leq K\}$ est borné dans X .

Preuve : $R > 0$, B_R désigne la boule ouverte de \mathbb{R}^3 de rayon R centrée à l'origine. Posons $1/|x| = V_1^R + V_2^R$ avec $V_1^R = 1/|x|$ sur B_R et $\text{supp } V_1^R \subset B_{2R}$

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2/|x| = \int_{\mathbb{R}^3} V_1^R |\varphi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V_2^R |\varphi|^2 \leq \|V_1^R\|_{3/2} \|\varphi\|_6^2 + \|V_2^R\|_{p/p-1} \|\varphi\|_{2p}^2 \leq C \|\nabla\varphi\|_2^\theta \|\varphi\|_{2p}^{1-\theta}$$

avec

$$\theta = (2p - 3)/(p - 2), \quad 0 < \theta < 1.$$

Pour obtenir cette dernière inégalité, les fonctions V ont pour support respectivement la boule de rayon R et son complémentaire. Les normes des fonctions V se calculent alors explicitement. Choissant R pour minimiser l'expression obtenue puis utilisant l'inégalité de Sobolev on obtient l'inégalité annoncée. D'où finalement :

$$E(\varphi) \geq \|\nabla\varphi\|_2^2 + 1/p \|\varphi\|_{2p}^{2p} - C \|\nabla\varphi\|_2^\theta \|\varphi\|_{2p}^{1-\theta} \geq \|\nabla\varphi\|_2^2 + 1/p \|\varphi\|_{2p}^{2p} - C/2 [\|\nabla\varphi\|_2^{2\theta} + \|\varphi\|_{2p}^{2(1-\theta)}]. \quad \blacksquare$$

Remarque : Pour $p \geq 3/2$, on peut montrer que la fonctionnelle n'est plus bornée inférieurement.

On rappelle maintenant une variante d'un résultat classique.

LEMME 1.7 : $\varphi \rightarrow \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2/|x|$ est faiblement continue sur X .

Preuve : Soit $\varphi_n \rightarrow \varphi$ faiblement dans X . Il suffit de démontrer que $|\varphi_n|^2/|x| \rightarrow |\varphi|^2/|x|$ dans $L^1(\mathbb{R}^3)$. C'est vrai dans $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$ et il vient :

$$\int_{|x| \geq R} |\varphi|^2/|x| \leq \|\varphi\|_{2p}^2 \int_{|x| \geq R} |x|^{p/(1-p)} = o(R). \quad \blacksquare$$

Soit u_n une suite minimisante pour E dans X . On remarque que l'on a toujours $E(|u_n|) \leq E(u_n)$. On peut donc supposer, ce que l'on fera dorénavant, que u_n est positive. La suite u_n étant bornée dans X , on en extrait une sous-suite encore notée u_n telle que u_n converge faiblement vers u dans X .

La fonction u ainsi obtenue est bien un minimum pour E . En effet, on a :

$$\begin{aligned} \|\nabla u\|_2 &\leq \liminf \|\nabla u_n\|_2 \\ \|u\|_{2p} &\leq \liminf \|u_n\|_{2p} \\ \int_{R^3} u^2/|x| &= \lim \int_{R^3} u_n^2/|x|. \end{aligned}$$

Les deux inégalités sont classiques. L'égalité est une application directe du lemme 1.2. ■

Il reste donc à vérifier $u \neq 0$, ce qui est fait ci-dessous par le lemme 1.8.

LEMME 1.8 : *Il existe $v : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ continue à symétrie sphérique et à support compact et tel que $E(v) < 0$.*

Preuve : Il vient $E(\lambda\varphi) = \lambda^2 \int (|\nabla\varphi|^2 - \varphi^2/|x|) + \lambda^{2p} \int |\varphi|^{2p}$. Or il est classique qu'il existe φ telle que $\int (|\nabla\varphi|^2 - \varphi^2/|x|) < 0$. En prenant λ suffisamment petit on a bien $E(\lambda\varphi) < 0$. ■

La fonction u ainsi obtenue est bien solution du problème (TFW) car $E \in C^1(X, \mathbb{R})$.

3.2. Comportement au voisinage de l'infini

Pour étudier le comportement à l'infini des solutions de TFW et établir l'unicité de notre solution, nous montrons tout d'abord qu'il existe une solution de TFW δ telle que toute autre solution de TFW est nécessairement plus grande que δ .

LEMME 2.1 : *Pour $p \geq 3/2$, on a $\delta = \varphi$.*

Preuve : Soit en effet v une solution positive de TFW, notons v_R la restriction de v à B_R . On a alors : $-\Delta v_R + v_R^{2p-1} - v_R/|x| = 0$ sur B_R et la restriction de v_R à ∂B_R est positive, donc par le lemme 4, $\varphi_R \leq v$ sur B_R et donc, $\varphi \leq v$.

Si $1 < p < 3/2$, en utilisant la solution φ construite précédemment comme sur-solution, nous construisons encore comme dans le cas $p \geq 3/2$ une solution δ de TFW. Ceci est fait en considérant la suite croissante des solutions (uniques) des problèmes tronqués dont tous les éléments sont majorés par φ , toujours grâce au lemme 1. Cette suite converge donc presque partout vers une fonction que nous notons δ . Cette fonction est une solution de TFW en effet, reprenant la méthode de la proposition 1.5, on

voit que la convergence des termes linéaires est standard et on est assuré de la convergence du terme non linéaire car on a :

$$\langle |\varphi_R|^{2p-2} \varphi_R, \eta \rangle = \int_{\mathbb{R}^R} \varphi_R^{2p-1} \eta \rightarrow \int_{\mathbb{R}^3} \delta^{2p-1} \eta$$

puisque

$$\varphi_R^{2p-1} \eta \rightarrow \delta^{2p-1} \eta \text{ pp et } \varphi_R^{2p-1} |\eta| \leq |\eta| \varphi^{2p-1} \in L^1(\mathbb{R}^3).$$

Cette suite converge donc bien presque partout vers une solution de TFW δ . La démonstration précédente s'applique donc à δ qui minore toutes les solutions de TFW. ■

LEMME 2.2 : Si u est solution de TFW alors $u(x) \rightarrow 0$ quand $|x| \rightarrow \infty$.

Preuve : Soit $\alpha = 1/(p - 1)$ et $q = 3/2(p - 1)$. $\alpha(2p - 1) = \alpha + 2$ et $q(2p - 1) = q + 3$. Soit $R > 0$, posant $\tau_R(x) = \lambda |x|^q / \{(3R/2 - |x|)^\alpha (|x| - R/2)^\alpha\}$ nous remarquons que pour λ suffisamment grand cette fonction est sur-solution de TFW sur la couronne limitée par les rayons $R/2$ et $3R/2$, et ceci pour tout $R > 0$. En effet, il vient :

$$\begin{aligned} L(\tau_R(x)) = & -\lambda |x|^{q-2} / \{(3R/2 - |x|)^{\alpha+2} (|x| - R/2)^{\alpha+2}\} \\ & \{q(q+1)(3R/2 - |x|)^2 (|x| - R/2)^2 + (4\alpha(q+1)|x| (|x| - R) + \\ & + 2\alpha|x|^2)(3R/2 - |x|)(|x| - R/2) + 4\alpha(\alpha+1)|x|^2 (|x| - R)^2 \\ & + |x| (3R/2 - |x|)^2 (|x| - R/2)^2 - \lambda^{2p-2} |x|^5\}. \end{aligned}$$

Nous en déduisons à partir du lemme 1 que, si u est une solution de TFW nous avons $u(x) \leq \tau_R(x)$ dans la couronne limitée par les rayons $R/2$ et $3R/2$ pour tout $R > 0$. En particulier, si $|x| = R$ on a $u(x) \leq \tau_R(R) = K|x|^{-1/(2p-2)}$. ■

LEMME 2.3 : $\forall \delta > 0 \exists R_\delta > 0$ tel que $\forall \alpha > 0$ et $\forall r \geq R_\delta$

$$L(w_{\delta\alpha})(r) \geq 0 \text{ avec les notations suivantes :}$$

$$w_{\delta\alpha}(r) = (1 + \delta) r^{-1/(2p-2)} + \alpha \text{ et}$$

$$L(w_{\delta\alpha})(r) = -\Delta w_{\delta\alpha}(r) + w_{\delta\alpha}(r)^{2p-1} - w_{\delta\alpha}(r)/r.$$

Preuve : $L(w_{\delta\alpha})(r) \geq 0$ s'écrit encore :

$$\begin{aligned} & [(2p-3)/(2p-2)^2](1+\delta) r^{[1/(2-2p)]-2} + \\ & + [(1+\delta) r^{1/(2-2p)} + \alpha]^{2p-1} - (1+\delta) r^{[1/(2-2p)]-1} - \alpha/r \geq 0. \end{aligned}$$

Or $t \rightarrow t^{2p-1}$ est convexe sur R^+ on a donc :

$$L(w_{\delta\alpha})(r) \geq [(2p-3)/(2p-2)^2](1+\delta)r^{-[1/(2p-2)]-2} - \alpha/r + (\alpha/r)(2p-1)(1+\delta)^{2p-1} + [(1+\delta)^{2p-1} - 1 - \delta]r^{-[1/(2p-2)]-1}.$$

Et on voit que le lemme est vrai car d'une part $(2p-1)(1+\delta)^{2p-1} \geq 1$ et d'autre part, $(1+\delta)^{2p-1} - 1 - \delta > 0$ pour $\delta > 0$. ■

PROPOSITION 2.4 : Si u est solution de TFW alors

$$\limsup u(x)|x|^{1/(2p-2)} = 1.$$

Preuve : Soit $\delta > 0$, posons

$$R_{0\delta} = \text{Min} \{r \geq R_\delta / \text{Max}_{|x|=r} (u(x)|x|^{1/(2p-2)}) \geq 1 + \delta\}.$$

Si l'ensemble des δ tels que $R_{0\delta}$ est défini est vide, la proposition est établie. Supposons donc que cet ensemble soit non vide. Pour tout $\alpha < 0$, il existe $R_\alpha > R_{0\delta}$ tel que pour $|x| \geq R_\alpha$ $u(x) < \alpha$, puisque l'on sait que u tend vers 0 à l'infini.

Pour $|x| \geq R_\alpha$ ou $|x| = R_{0\delta}$ on a bien par construction $u(x) \leq w_{\delta\alpha}(x)$ d'autre part, pour $|x| \geq R_{0\delta}$, il vient $0 = L(u)(x) \leq L(w_{\delta\alpha})(x)$. Le principe du maximum s'adapte donc bien (cf. appendice) et on en déduit que $u(x) \leq w_{\delta\alpha}(x)$ dès que $|x| \geq R_{0\delta}$. Comme cette inégalité est vraie pour tout $\alpha > 0$, on en déduit, en prenant l'inf sur $\alpha > 0$ de la famille $w_{\delta\alpha}(x)$ que

$$u(x) \leq (1+\theta)|x|^{-1/(2p-2)} \text{ dès que } |x| \geq R_{0\delta}$$

Soit : $\limsup u(x)|x|^{1/(2p-2)} \leq 1$ et ceci pour toute solution de TFW.

Montrons maintenant que cette limite supérieure vaut 1 pour δ . Comme δ est la plus petite solution de TFW, ceci montrera la proposition pour toute solution de TFW. Dire que pour δ cette lim sup est strictement plus petite que 1 revient à dire qu'il existe une constante ν telle que pour $|x|$ suffisamment grand, on ait :

$$-\Delta\delta - \nu\delta x/|x| \geq 0,$$

δ étant à symétrie sphérique, $v(r) = r\delta(r)$ vérifie : $v'' + v/r \leq 0$. Comme v est positive cela revient à dire que v est concave. Si v' est strictement négative en un point, $v \rightarrow -\infty$ lorsque $r \rightarrow \infty$ ce qui contredit la positivité de u . La fonction v est donc croissante. Il existe $\sigma > 0$ tel que pour tout r assez grand on ait $v(r) \geq \sigma$ soit $\delta(r) \geq \sigma/r$. Pour $p > 3/2$ on a une contradiction avec l'inégalité :

$$\limsup u(x)|x|^{1/(2p-2)} \leq 1$$

Si $p \leq 3/2$ on voit que δ vérifie :

$$-\Delta\delta - \nu\sigma/|x|^2 \geq 0$$

pour $|x|$ suffisamment grande. Par un changement d'échelle on se ramène au cas où :

$$-\Delta\delta - \mu/|x|^2 \geq 0$$

dès que $|x| \geq 1$ avec $\mu > 0$.

Soit v_R la fonction à symétrie sphérique qui s'annule en 1 et en R qui vérifie : $-\Delta v_R - \mu/|x|^2 = 0$.

Alors il vient $v_R \leq \delta$ et un calcul élémentaire montre que

$$v_R(r) = -\mu \ln(r) + \mu[R \ln(R)/(R-1)](1-1/r).$$

En particulier :

$$\delta(R) \geq v_{2R}(R) = \mu(2 \ln(2R) - \ln(R)) \rightarrow 2\mu \ln 2 \quad \text{quand } r \rightarrow \infty.$$

Ce qui contredit le fait que δ a une limite nulle à l'infini. ■

LEMME 2.5 : Si u est une solution de TFW, alors :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u(x)|x|^{1/(2p-2)} = 1.$$

Preuve : Il existe une suite croissante tendant vers l'infini r_k et une suite ε_k tendant vers 0 en décroissant, telles que

$$u(r_k) \geq (1 - \varepsilon_k) r_k^{-1/(2p-2)}$$

puisque $\limsup u(x)|x|^{-1/(2p-2)} = 1$

Soit k fixé et $1 > n > k$. Sur la couronne limitée par les rayons r_n et r_1 , l'application du lemme 1 nous donne :

$u(r) \geq (1 - \varepsilon_k) r^{-1/(2p-2)}$ pour n suffisamment grand, car alors $(1 - \varepsilon_k) r^{-1/(2p-2)}$ est sous-solution pour TFW sur cette couronne. Le rayon extérieur étant arbitraire, nous en déduisons que

$$u(r) \geq (1 - \varepsilon_k) r^{-1/(2p-2)} \quad \text{pour } r \geq r_n.$$

Le nombre ε_k étant arbitrairement petit, nous en déduisons le résultat annoncé. ■

Remarque : Dans [7], Lieb précise le résultat du lemme 11 pour les cas correspondant à $3/2 < p < 2$ en donnant le développement asymptotique de la solution au voisinage de l'infini.

3.3. Unicité de la solution

LEMME 3.1 : *Le problème TFW a une solution unique.*

Preuve : Soit u une solution de TFW et soit R_n une suite de nombres tendant en croissant vers l'infini. Les résultats précédents montrent que :

$$\lim \delta(R_n) R_n^{1/(2p-2)} = 1$$

$$\lim \left(\text{Max}_{|x|=R_n} u(x) \right) R_n^{1/(2p-2)} = 1 \quad \text{quand } n \rightarrow \infty .$$

Pour $\varepsilon > 0$ pour tout n suffisamment grand, on a :

$$\text{Max}_{|x|=R_n} u(x) \leq (1 + \varepsilon) \delta(R_n) .$$

Comme $(1 + \varepsilon) \delta$ est une sur-solution pour TFW, on en déduit que pour tout n suffisamment grand on a bien $u \leq (1 + \varepsilon) \delta$ dans la boule de rayon R_n et donc que $u \leq (1 + \varepsilon) \delta$ pp. Comme ε est arbitrairement petit, on tire enfin $u \leq \delta$ pp et, comme on a vu que δ était la plus petite des solutions de TFW, on en tire : $u = \delta$.

La démonstration du théorème est donc terminée. ■

Une conséquence de notre travail est le fait suivant :

Pour $p > 1$, si $\lambda \leq 0$ et v vérifie l'équation

$$(*) - \Delta v + |v|^{2p-2} v - v/|x| = \lambda v ; \quad v \in L_{loc}^{2p-1}(R^3) .$$

Alors $|v| \leq u$.

Par l'inégalité de Kato il vient $L(|v|) \leq 0$. Si nous considérons le problème $L(u) = 0$ sur B_R avec la condition aux limites $u|_{\delta B_R} = |v|$ nous obtenons une suite de solutions positives u_R qui tendent, quand $R \rightarrow \infty$, vers la solution de TFW aux sens des distributions. Comme $u_R \geq |v|$ sur B_R on en déduit $u \geq |v|$.

CONCLUSION

Nous avons donc établi un résultat d'existence et d'unicité pour TFW et nous avons pu préciser certaines propriétés de cette solution en utilisant de manière systématique les techniques de sur- et sous-solutions. Une application de ce résultat consiste à trouver une borne supérieure optimale et explicite pour les solutions de l'équation aux valeurs propres. De tels problèmes sont aussi étudiés dans Benguria-Brezis-Lieb [3] où l'existence de la borne pour la norme L^2 de la solution positive du problème aux valeurs propres est établie.

Appendice : $-\Omega$ désignera dans la suite un ouvert borné. On posera que $L(\varphi) = -\Delta\varphi + |\varphi|^{2p-2}\varphi - \varphi/|x|$, u et v sont supposées continues.

LEMME 1 : Si u et v sont positives sur Ω , si $u \leq v$ sur $\partial\Omega$ et $L(u) \leq 0 \leq L(v)$ sur Ω alors $u \leq v$ sur Ω .

Preuve : Commençons par établir que si $L(v) \geq 0$ sur Ω et si $v > 0$ sur Ω alors on a pour tout g de $D(\Omega)$:

$$\int_{\Omega} (|\nabla g|^2 + v^{2p-2}g^2 - g^2/|x|) \geq 0$$

En effet, si $g \in C_0^\infty(\Omega)$ on a l'inégalité :

$$-\int_{\Omega} (\Delta\varphi/\varphi) g^2 \leq \int_{\Omega} |\nabla g|^2$$

il vient :

$$\begin{aligned} -\int_{\Omega} (\Delta\varphi/\varphi) g^2 &= \int_{\Omega} \nabla\varphi((2g\nabla g/\varphi) - g^2\nabla\varphi/\varphi^2) \leq \\ &\leq 2\left[\int_{\Omega} g^2|\nabla\varphi|^2/\varphi^2 \int_{\Omega} |\nabla g|^2\right]^{1/2} - \int_{\Omega} g^2|\nabla\varphi|^2/\varphi^2 \leq \int_{\Omega} |\nabla g|^2. \end{aligned}$$

D'où la positivité de la forme quadratique. Soit maintenant $w = (u - v)^+$ on peut écrire :

$$\int_{\Omega} (L(v) - L(u)) w \geq 0$$

ce qui peut s'écrire autrement :

$$\int_{\Omega^-} (|\nabla w|^2 + \{(u^{2p-1} - v^{2p-1})/(u - v)\} w^2 - w^2/|x|) \leq 0.$$

Utilisant la convexité de la non-linéarité, il vient :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^-} (|\nabla w|^2 + \{(u^{2p-1} - v^{2p-1})/(u - v)\} w^2 - w^2/|x|) &\geq \\ &\geq \int_{\Omega^-} (|\nabla w|^2 + (2p - 1)v^{2p-2}w^2 - w^2/|x|). \end{aligned}$$

Le second membre de cette inégalité doit être lui-même strictement positif si Ω^- est non trivial ; comme cela a été montré au début de cette preuve. Ceci est en contradiction avec la chaîne précédente d'inégalité et établit donc le lemme.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] AMBROSETTI-RABINOWITZ, *Dual Variational methods in Critical point Theory and applications*. J. of Funct. Anal. 14, 349, 381 (1973).
- [2] BAUMGARTNER, *The Thomas-Fermi-Theory as Result of a Strong-Coupling-Limit*. Commun. Math. Phys. 47, 215-219 (1976).
- [3] BENGURIA-BREZIS-LIEB, *The TFW theory of atoms and molecules*. Commun. in Math. Phys. 79, 167, 180 (1981).
- [4] BERESTICKY-LIONS, *Non linear scalar field equation part I, II*. Arch. for Rat. Mec. and Anal. 82, n° 4, 313, 345 et 347, 375 (1983).
- [5] LANDAU et LIFCHITZ, *Mécanique Quantique ed. Mir* (1971, Moscou).
- [6] LIEB, *Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules*. Rev. of Mod. Phys. 53, n° 4, p.1 October 1981.
- [7] LIEB, *Analysis of TFW equation for an infinite atom without electron repulsion*. Comm. Math. Phys. 85, p. 15 (1982).
- [8] P. L. LIONS, *Some remarks on Hartree equation*. Nonlinear Anal. T.M.A. 5 (1981) 1245-1256.