Commun. Math. Phys. 69, 131–146 (1979)

Communications in
Mathematical
Physics

Fonctions Propres et Non-Existence Absolue D'Etats Liés dans Certains Systèmes Quantiques

Bernard Gaveau

Université P. et M. Curie (Mathématiques), F-75230 Paris Cedex 05, France

Abstract. One proves a condition of absence of bound states for a Schrödinger operator independent of any self-adjoint extension. The method of proof uses Feynman Kac formula.

Introduction

Considérons un système quantique à n degrés de liberté dont l'hamiltonien est $-\frac{1}{2}\Delta+V$ où Δ est le laplacien de $\mathbb{R}^n$ et V le potentiel d'interaction (i.e. une fonction mesurable sur $\mathbb{R}^n$). La théorie mathématique «usuelle» se fait d'habitude en définissant un hamiltonien H comme extension autoadjointe de $-\frac{1}{2}\Delta+V$ à l'espace $L^2(\mathbb{R}^n)$ définie sur un domaine $D\subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dense. En particulier, il peut y avoir une infinité de telles extensions. En général, on en choisit une a priori, par exemple, «l'extension de Rayleigh-Ritz» H_1 où H est définie comme somme de formes quadratiques. On étudie alors les propriétés des fonctions propres et des valeurs propres relativement à cette extension. Dans le cas de l'extension comme somme de formes quadratiques, la première valeur propre est donnée par la formule variationelle de Rayleigh-Ritz et on peut en déduire divers critères d'absence d'états liés (voir [2, 4, 7] pour ce point de vue).

Un autre point de vue consiste à définir directement un semi-groupe de Feynman-Kac P_t par la formule de Kac (voir [3]). Sous certaines hypothèses, ce semi-groupe admet un générateur infinitésimal autoadjoint H_2. On dira alors que le système a un état lié pour l'extension de Feynman-Kac H_2, si il existe ψ de classe L^2 et $\lambda<0$ avec $(P_t\psi)(x)=e^{-\lambda t}\psi(x)$ pour tout λ. Le plus petit λ à satisfaire cette équation vérifie l'estimée de Kac ([3] et corollaire du lemme 4 du section 1) et dans [1] on démontre l'absence d'états liés relativement à l'extension de Feynman-Kac sous certaines hypothèses.

Un troisième point de vue consiste, lorsque V est localement bornée, à définir l'équation

$$(-\tfrac{1}{2}\Delta+V)\psi=\lambda\psi \tag{0}$$

0010-3616/79/0069/0131/$03.20

pour ψ dans L^2, λ réel, au sens des distributions indépendamment de toute notion d'extension autoadjointe. On dira que le système quantique *n'a pas d'état lié de façon absolue*, si l'équation précédente pour ψ de L^2 entraîne que $\lambda \geqq 0$ sans vérifier à priori que ψ est dans le domaine de définition d'une extension particulière.

Le problème naturel se pose alors de comparer les trois points de vue et de donner des critères d'absence absolue d'états liés indépendamment de toute extension autoadjointe. Le résultat principal est que si V est une fonction localement bornée, L^p pour un $1 \leqq p \leqq +\infty$ telle que

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n} |GV^-(x)| < \tfrac{1}{2}$$

alors l'équation (0) satisfaite pour $\psi \in L^2$ implique nécessairement $\lambda \geqq 0$ (absence absolue d'états liés) et que $e^{-\lambda t}\psi(x) = (P_t \psi)(x)$. De plus ψ est dans le domaine de l'extension de Feynman-Kac ou de Rayleigh Ritz et ψ a ses dérivées premières de carré intégrable.

Le section 1 contient des estimées de routine sur le semi-groupe de la chaleur de Feynman-Kac et une borne inférieure de la première valeur propre.

Le section 2 compare l'extension de Feynman-Kac à l'extension de Rayleigh Ritz (i.e. à hamiltonien défini comme somme de formes quadratiques).

Le section 3 démontre des formules de Itô et de Dynkin pour des classes de fonctions non régulières.

Le section 4 démontre le résultat énoncé ci-dessus, l'estimée principale consistant à démontrer que les termes d'intégration par parties sont négligeables lorsque le bord des domaines s'éloigne à l'infini (spécifier une extension autoadjointe revient d'ailleurs plus ou moins à spécifier quels sont ces termes d'intégration par parties).

Notations. Le système quantique considéré a n degrés de liberté et ici *n sera toujours supérieur à* 3. L'espace de configuration est $\mathbb{R}^n$; Δ est le laplacien euclidien; le potentiel d'interaction V est une fonction mesurable sur $\mathbb{R}^n$ et $V = V^+ - V^-$ est sa décomposition en parties positives et négatives. Ω est l'espace de probabilités du mouvement brownien standard de $\mathbb{R}^n$ de générateur infinitésimal $\frac{1}{2}\Delta$ et $X_\omega(t)$ est la trajectoire; P_x est la probabilité conditionnelle sachant que $X_\omega(0) = x$. Soit $g(x,y)$ le noyau de Green de $\frac{1}{2}\Delta\, g(x,y) = \dfrac{2\sigma_{n-1}}{n-2} \dfrac{1}{|x-y|^{n-2}}$ (σ_{n-1} est l'aire de la sphère unité de $\mathbb{R}^n$). Soit G l'opérateur de noyau $g(x,y)$.

Le résultat principal de [1] est le suivant: *si f est fonction mesurable positive et si*

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n} (Gf)(x) < 1$$

alors

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n} E_x\left(\exp\left(\int_0^{+\infty} f(X_\omega(t))\,dt\right)\right) \quad \textit{est fini}.$$

1. Construction et estimées du semi-groupe de la chaleur

Posons pour tout réel >0, q,

$$\begin{aligned}\alpha_q(t) &= \max_{x\in\mathbb{R}^n} E_x\left(\exp\left(-q\int_0^t V(X_s)ds\right)\right)\\ \alpha_q^-(t) &= \max_{x\in\mathbb{R}^n} E_x\left(\exp\left(q\int_0^t V^-(X_s)ds\right)\right)\end{aligned}\tag{1}$$

de sorte que $\alpha_q(t)\leqq\alpha_q^-(t)$.

Lemme 1. *Si $\alpha_q^-(t)$ est fini pour un t_0, il est fini pour tout t ainsi que $\alpha_q(t)$.*

Preuve. Cela résulte immédiatement de la propriété de Markov, et de ce que $\alpha_q^-(t)$ est fonction croissante de t. On vérifie en effet que

$$\alpha_q^-(nt_0)\leqq(\alpha_q^-(t_0))^n$$

pour tout entier $n>0$.

Définissons maintenant l'opérateur P_t suivant

$$(P_tf)(x)=E_x\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s)ds\right)f(X_t)\right)\tag{2}$$

où f est fonction mesurable quelconque quand l'intégrale a un sens (voir [3]).

Lemme 2. 1) *Si $\alpha_1(t)$ est fini pour tout t; P_t est un semi-groupe qui opère continûment de $L^p(\mathbb{R}^n)$ dans $L^p(\mathbb{R}^n)$ pour tout $1\leqq p\leqq+\infty$ et on a $\|P_tf\|_{L^p,L^p}\leqq\alpha_1(t)$. De plus si $f\geqq0$, $P_tf\geqq0$.*

2) *Si $\alpha_q(t)$ est fini, P_t opère continûment de $L^p(\mathbb{R}^n)$ dans $L^\infty(\mathbb{R}^n)$ avec $\|P_t\|_{L^p,L^\infty}\leqq(\alpha_q(t))^{1/q}$ où $\dfrac{1}{p}+\dfrac{1}{q}=1$.*

Preuve. 1) Considérons le cas $p=+\infty$: par définition

$$|(P_tf)(x)|\leqq\|f\|_{L^\infty}E_x\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s)ds\right)\right)$$

d'où le résultat.

Considérons le cas $p=1$. On calcule

$$\begin{aligned}|(P_tf)(x)|dx &\leqq \int E_x\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s)ds\right)|f|(X_t)\right)dx\\ &= \int E_0\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s+x)ds\right)|f|(X_t+x)\right)dx\\ &= E_0\int\exp\left(-\int_0^t V(X_s-X_t+x)ds\right)|f|(x)dx.\end{aligned}$$

Mais pour t fixé, X_s-X_t est un brownien standard pour $s\leqq t$ du type b_{t-s} issu de 0 et donc

$$\int|P_tf(x)|dx\leqq\alpha_1(t)\int|f|(x)dx.$$

Le cas $1<p<+\infty$ s'obtient en appliquant le théorème d'interpolation de Riesz-Thorin.

2) S'obtient par estimée de Hölder

$$|P_t f(x)| \leqq \left[E_x\left(\exp\left(-q\int_0^t V(X_s)ds\right)\right)\right]^{1/q} [Q_t(|f|^p)(x)]^{1/p}$$

où Q_t est le noyau de la chaleur euclidien usuel ($V=0$).

On vérifie aisément que P_t est un semi-groupe de Markov

Lemme 3. *P_t est un semi-groupe autoadjoint au sens que si f, est dans $L^p(\mathbb{R}^n)$ et g dans $L^q(\mathbb{R}^n)$ avec $\frac{1}{p}+\frac{1}{q}=1$, on a*

$$\int f(x)(P_t g)(x)dx = \int (P_t f)(x) g(x) dx. \tag{3}$$

Preuve. Il suffit de reprendre le calcul fait dans le lemme précédent

$$\begin{aligned}\int f(x)(P_t g)(x)dx &= \int E_0\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s+x)ds\right)g(X_t+x)\right)f(x)dx\\ &= \int E_0\left(\exp\left(-\int_0^t V(X_s-X_t+x)ds\right)f(x-X_t)\right)g(x)dx\end{aligned}$$

et d'utiliser que $X_s-X_t=b_{t-s}$ est un brownien standard issu de 0. Nous dirons que P_t *est le semi-groupe de Feynman-Kac de* $-\frac{1}{2}\Delta+V$.

Lemme 4. *Supposons qu'il existe $\varepsilon>0$ et p $1\leqq p\leqq+\infty$ tels que $V\in L^p$ et que $\alpha^-_{1+\varepsilon}(t)$ soit fini. Alors $P_t f$ tend vers f dans L^r pour tout $1\leqq r<+\infty$ si $t\to 0^+$.*

Preuve. Faisons cette démonstration en plusieurs étapes.

1) Si f est continue à support compact, $P_t f\to f$ presque partout. En effet nous avons

$$\begin{aligned}(P_t f)(x)-f(x) &= E_x\left((f(X_\omega(t))-f(x))\exp\left(-\int_0^t V(X_\omega(s))ds\right)\right)\\ &\quad + f(x)E_x\left(\exp\left(-\int_0^t V(X\ (s))ds\right)-1\right).\end{aligned} \tag{4}$$

a) Le premier terme se majore par Hölder.

$$E_x\left(\exp\left(-(1+\varepsilon)\int_0^t V(X\ (s))ds\right)\right)^{\frac{1}{1+\varepsilon}} E_x(|f(X_\omega(t))-f(x)|^\alpha)^{\frac{1}{\alpha}}$$

pour un $\alpha<+\infty$. Mais la seconde espérance tend vers 0 car elle représente l'action du semi-groupe de la chaleur euclidien usuel dont on sait qu'il est fortement continu. La première espérance est majorée par $\alpha_{1+\varepsilon}(t)$.

b) Le second terme de (4) se majore par

$$\|f\|_{L^\infty} E_x\left(\int_0^t ds V(X_\omega(s)) \exp\left(-\int_0^s V(X_\omega(u))du\right)\right).$$

Si $p=+\infty$, cela se majore par

$$\|f\|_{L^\infty}\|V\|_{L^\infty}\int_0^t ds\alpha_1(s) \leqq \|f\|_{L^\infty}\|V\|_{L^\infty}\alpha_1^-(t)t.$$

qui tend bien vers 0.

Si $1\leqq p<+\infty$, l'intégrale est

$$\|f\|_{L^\infty}\int_0^t ds(P_sV)(x).$$

Mais

$$\begin{aligned}\int dx\left|\int_0^t ds(P_sV)(x)\right|^p &\leqq t^{p-1}\int_0^t ds\|P_sV\|_{L^p}^p \\ &\leqq t^{p-1}\|V\|_{L^p}^p\int_0^t \alpha_1^-(s)^p ds\end{aligned}$$

à cause du lemme 2.

Par suite le second terme tend vers 0 preque partout ce qui achève la première étape.

2) Montrons que pour f continue à support compact, P_tf tend vers f au sens L^r $1\leqq r<+\infty$. On a

$$\begin{aligned}\int |P_tf-f|^p dx &\leqq \int_{|P_tf-f|\geqq\varepsilon}|P_tf-f|^p dx + \int_{|P_tf-f|<\varepsilon}|P_tf-f|^p dx \\ &\leqq \left(\int_{|P_tf-f|\geqq\varepsilon}dx\right)\cdot(\alpha_1(t)+1)\|f\|_{L^\infty}+\varepsilon^{p-1}(\alpha_1(t)+1)\|f\|_{L^1}\end{aligned}$$

en tenant compte du lemme 1. Par la 1ère étape, $\int_{|P_tf-f|\geqq\varepsilon} dx$ tend vers 0, d'où le résultat.

3) Montrons que $P_tf\to f$ au sens L^r pour tout $f\in L^r$. Soit f_n une suite de fonctions continues à support compact qui tend vers f au sens $L^r(1\leqq r<+\infty)$. On a alors

$$\begin{aligned}\|P_tf-f\|_{L^r} &\leqq \|P_t(f-f_n)\|_{L^r}+\|P_tf_n-f_n\|_{L^r}+\|f_n-f\|_{L^r} \\ &\leqq(\alpha_1^-(t)+1)\|f_n-f\|_{L^r}+\|P_tf_n-f_n\|_{L^r}\end{aligned}$$

d'où le résultat.

Désignons maintenant par $\lambda_1^{(r)}$ le plus petit nombre réel tel qu'il existe $\psi\in L^r$ avec

$$P_t\psi=e^{-\lambda_1 t}\psi \quad \text{pour tout } t. \tag{5}$$

Corollaire. *Supposons que $\alpha_1(t)$ soit fini pour tout t. On a alors:*

$$\lambda_1^{(r)} \geqq -\frac{\log \alpha_1(t)}{t} \geqq -\frac{\log \alpha_1^-(t)}{t}. \tag{6}$$

Preuve. On a en effet $e^{-\lambda_1^{(r)} t} \leqq \alpha_1(t) \leqq \alpha_1^-(t)$ par le lemme 2.

Remarque. On dit que le système quantique décrit par $-\frac{1}{2}\Delta + V$ n'a pas d'états liés dans l'extension de Feynman Kac si $\lambda_1^{(r)} \geqq 0$. C'est la définition en général employée en particulier dans [1] où l'on montre l'absence d'états liés pour certains potentiels en montrant que $\alpha_1^-(t)$ reste borné pour tout $t < +\infty$. La fonction propre ψ satisfaisant (5) est automatiquement dans le domaine du générateur H de P_t qu'on peut considérer comme étant une extension de l'opérateur $-\frac{1}{2}\Delta + V$ appelée *extension de Feynman Kac de* $-\frac{1}{2}\Delta + V$.

Si on résume les lemmes 2–4, on peut conclure que *si $V \in L^p(\mathbb{R}^n)$ pour un $1 \leqq p \leqq +\infty$ et si il existe $\varepsilon > 0$ tel que $\alpha_{1+\varepsilon}^-(t)$ est fini pour un $t > 0$, alors P_t est un semi groupe autoadjoint fortement continu de L^r dans L^r pour tout $1 \leqq r < +\infty$, du type $P_t = e^{-tH}$ où H est opérateur autoadjoint sur L^r.*

2. Comparaison de H à l'extension définie par les formes quadratiques

Comparons l'extension de Feynman Kac H à l'extension de $-\frac{1}{2}\Delta + V$ définie usuellement en analyse fonctionnelle par une somme de formes quadratiques (extension de Kato).

Rappelons d'abord rapidement cette définition; on considère d'abord l'espace de Sobolev H^1 des fonctions L^r à dérivées de carré intégrable avec la forme quadratique $Q_0(f,g) = \int \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} dx$. On considère ensuite la forme quadratique

$$\pi_V(f,g) = \int V f g \, dx$$

et on note D_V l'espace des f tel que $\pi_V(f,f) < +\infty$. On considère $H^1 \cap D_V$ sur lequel on définit la forme quadratique $Q_V = Q_0 + \pi_V$. Alors Q_V est domaine d'un opérateur appelé $\tilde{H}$. Nous allons montrer en nous inspirant de Klein-Landau [5], le résultat suivant.

Théorème 1. *Supposons $V \in L^p$ pour un $1 \leqq p \leqq +\infty$ et qu'il existe $\varepsilon > 0$ et $t < +\infty$ avec $\alpha_{1+\varepsilon}^-(t) < +\infty$.*

1) *L'extension H est restriction autoadjointe de la somme des formes de H_0 et V.*

2) *Si $p \geqq 2$, $H_0 + V$ est essentiellement autoadjoint et H est sa fermeture.*

Preuve. Nous suivrons de près le raisonnement de [5], p. 56 et suivantes. Posons $\mathscr{D} = e^{-H}(L^\infty \cap L^1) \subset L^\infty \cap L^1$ (par le lemme 2) qui est un «coeur» de H. On va utiliser.

Lemme 5. *Si $f \in \mathscr{D}$, $\int f(x) \frac{Q_t f(x) - P_t f(x)}{t} dx$ converge vers $\int f(x)^2 V(x) dx$, où Q_t désigne le noyau de la chaleur euclidien de $\frac{1}{2}\Delta$ i.e.*

$$(Q_t f)(x) = E_x(f(X_\omega(t))) = \int q_t(x-y) f(y) dy$$

où

$$q_t(x) = \frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2t}\right).$$

Admettant ce lemme 5 pour un instant, nous voyons que si $f \in \mathscr{D}$, f est contenu dans le domaine de la forme quadratique Q_0 et que $H|_{\mathscr{D}} = H_0 + V$ comme somme de formes quadratiques et cela achève la première partie du théorème 1.

Démonstration du lemme 5. Posons donc:

$$I_t = \int f(x) \frac{(Q_t f)(x) - (P_t f)(x)}{t} dx$$

$$\begin{aligned} B_t &= \frac{1}{t}\left[\exp\left(-\int_0^t V(X_\omega(s))ds\right) - 1\right] \\ &= \frac{-1}{t} \int_0^t ds V(X_\omega(s)) \exp\left(-\int_0^s V(X_\omega(u))du\right). \end{aligned}$$

Calculons, en utilisant les expressions probabilistes de P_t et Q_t

$$\begin{aligned} I_t - \int V(x) f^2(x) dx &= \int dx f(x) [E_x(f(X_\omega(t))B_t) - V(x) f(x)] \\ &= \int f(x) dx [E_x((f(X_\omega(t)) - f(x))) V(x) \\ &\quad + E_x(f(X_\omega(t))(B_t - V(x)))]. \end{aligned} \tag{7}$$

a) Traitons le second membre de (7) et d'abord la première espérance dans le crochet.

$$\begin{aligned} |\int f(x) dx E_x(f(X_\omega(t)) - f(x)) V(x)| &\leq \|f V\|_{L^p}^{\frac{1}{p}} \\ &\quad \cdot \|E_x(f(X_\omega(t))) - f(x)\|_{L^q}^{\frac{1}{q}} \end{aligned} \tag{8}$$

où $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.

Comme $f \in L^\infty$, $V \in L^p$, $Vf \in L^p$ et de plus f est dans L^q et

$$\|E_x(f(X_\omega(t))) - f(x)\|_{L^q} = \|Q_t f(x) - f(x)\|_{L^q} \quad \text{tend vers 0 si} \quad t \to 0$$

par forte continuité de Q_t dans L^q.

b) Traitons maintenant la seconde espérance dans le second membre de (7). On a

$$\begin{aligned} &|\int f(x) dx E_x(f(X_\omega(t))(B_t - V(x)))| \\ &= \left|\frac{1}{t} \int_0^t ds \int f(x) dx E_x(f(X_\omega(t))(V(X_\omega(s))\right| \exp\left(-\int_0^s V(X_\omega(u)du) - V(x)\right). \end{aligned} \tag{9}$$

Appliquons la propriété de Markov à l'espérance figurant au second membre de (9); posant

$$g(x) = E_x(f(X_\omega(t-s))) \equiv (Q_{t-s} f)(x).$$

(9) devient

$$\left|\frac{1}{t}\int_0^t ds \int f(x)dx\, E_x\left(g(X_\omega(s))\left(V(X_\omega(s))\exp\left(-\int_0^s V(X_\omega(u))du\right)-V(x)\right)\right)\right|$$

$$\leqq \frac{1}{t}\int_0^t ds \int |f(x)|dx \left|E_x\left(g(X_\omega(s))\,V(X_\omega(s))\exp\left(-\int_0^s V(X_\omega(u))du\right)\right)-g(x)\,V(x)\right|$$

$$+\frac{1}{t}\int_0^t ds \int |f(x)|dx|E_x(g(X_\omega(s)))-g(x)||V(x)|$$

$$\leqq \frac{1}{t}\int_0^t ds \int |f(x)|ds|P_s(gV)-gV|(x)$$

$$+\frac{1}{t}\int_0^t ds \int |f(x)\,V(x)||Q_s g-g|(x)dx\,. \tag{10}$$

Ici V est dans L^p, et g est dans L^r pour tout $1 \leqq r \leqq +\infty$ car f l'est et que $g=Q_{t-s}f$. Par suite gV est dans L^p si $p<+\infty$ et dans L^r si $p=+\infty$. Par la forte continuité de P_t dans L^r pour $r<+\infty$, le premier terme du dernier membre de (10) tend vers 0.

De même fV est dans L^p et g est dans L^q, donc comme $Q_s g-g \to 0$ si $s \to 0$ dans $L^q\left(\frac{1}{p}+\frac{1}{q}=1\right)$ le second terme du dernier membre de (10) tend vers 0. Ainsi dans le second membre de (7), la seconde espérance tend vers 0 et cela termine à la fois la démonstration du lemme 5 et la première partie du théorème 1.

La seconde partie du théorème 1 utilisera encore $f \in \mathscr{D}=e^{-H}(L^\infty \cap L^1)$. Le raisonnement d'analyse fonctionnelle de Klein et Landau [5], pp. 57–58 montre qu'il suffit de prouver le lemme.

Lemme 6. *Supposons $p \geqq 2$, V dans L^p et f dans $\mathscr{D}$. Alors $\frac{P_t f-Q_t f}{t}$ converge vers Vf au sens L^2.*

Démonstration du lemme 6. Utilisons l'expression probabiliste de P_t et de Q_t. Nous avons

$$\int dx\left|\frac{Q_t f(x)-P_t f(x)}{t}+V(x)\,f(x)\right|^2=\int dx|E_x(f(X_\omega(t))B_t)-V(x)\,f(x)))^2| \tag{11}$$

où l'on a utilisé la notation B_t du lemme 5

$$\leqq \int dx|V(x)|^2|E_x(f(X_\omega(t))-f(x))|^2$$
$$+\int dx|E_x(f(X_\omega(t))(B_t-V(x)))|^2\,. \tag{12}$$

Le premier terme de (12) se majore par

$$\int dx|V(x)|^2|E_x(f(X_\omega(t))-f(x))|^2 \leqq \|V\|_{L^p}^{\frac{2}{p}}\|Q_t f-f\|_{L^{2p/p-2}}^2 \tag{13}$$

et tend donc vers 0 par forte continuité au noyau de la chaleur euclidien (on utilise ici que $p \geqq 2$).

Le second terme de (12) se réécrit

$$\int dx \left| E_x\left(f(X_\omega(t)) \left[\frac{1}{t} \int_0^t ds \left(V(X_\omega(s)) \exp\left(- \int_0^s V(X_\omega(u)) du \right) - V(x) \right) \right] \right) \right|^2$$
$$\leqq \frac{1}{t} \int_0^t ds \int dx \left| E_x\left(f(X_\omega(t)) \left(V(X_\omega(s)) \exp\left(- \int_0^s V(X_\omega(u)) du \right) - V(x) \right) \right) \right|^2 . \tag{14}$$

Maintenant en appliquant la propriété de Markov à l'espérance dans (14) cela est en posant $g(x) = E_x(f(X_\omega(t-s)))$

$$\frac{1}{t} \int_0^t ds dx \left| E_x\left(g(X_\omega(s)) \left(V(X_\omega(s)) \exp\left(- \int_0^s \mathrm{V}(\mathrm{X}_\omega(\mathrm{u})) \mathrm{du} \right) - \mathrm{V}(\mathrm{x}) \right) \right) \right|^2$$
$$\leqq \frac{1}{t} \int_0^t ds \int dx \left| E_x\left(g(X_\omega(s)) V(X_\omega(s)) \exp\left(- \int_0^s V(X_\omega(u)) du \right) - g(x) V(x) \right) \right|^2$$
$$+ \frac{1}{t} \int_0^t ds \int dx |E_x(g(X_{\mathrm{w}}(s)) - g(x)) V(x)|^2 . \tag{15}$$

Le premier terme de (15) se réécrit

$$\frac{1}{t} \int_0^t ds \int dx |P_s(gV) - gV|^2 .$$

Mais V est L^p et g est L^r pour tout $1 \leqq r \leqq +\infty$, donc comme $p \geqq 2$, gV est L^r et donc comme Ps est fortement continu en $s=0$ dans L^r, le premier terme de (15) tend vers 0.

Le second terme de (15) se contrôle aussi facilement de la même façon. Ceci montre que par (15), (13) et (12), l'expression (11) tend vers 0 et cela achève à la fois les démonstrations des lemme 6 et théorème 1, 2ème partie.

3. Calcul différentiel stochastique avec les fonctions H^2_{loc}

En vue de la démonstration du section 4 donnons un petit lemme technique destiné à généraliser la formule de Itô et les formules de Dynkin à la classe H^2_{loc} des fonctions qui sont localement L^2 ainsi que leurs dérivées d'ordre $\leqq 2$.

Notons T_R le premier temps de sortie de la boule de centre 0 et de rayon R si $R < +\infty$ et $T_\infty = +\infty$.

Lemme 7. 1) *Soit f de la classe $H^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Il existe un ensemble E_f de mesure nulle tel que pour tout $x_0 \notin E_f$ pour tout $t < +\infty$, tout $R \leqq +\infty$, on ait P_{x_0}-presque sûrement*

$$f(X_\omega(t \wedge T_R)) = f(x_0) + \int_0^{t \wedge T_R} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_\omega(s)) dX^i_\omega(s)$$
$$+ \tfrac{1}{2} \int_0^{t \wedge T_R} (\Delta f)(X_\omega(s)) ds . \tag{16}$$

Supposons de plus que Δf soit localement borné. Il existe alors un ensemble K_f de capacité nulle, tel que pour tout $x_0 \notin K_f$, on ait P_{x_0}-presque sûrement, pour tout $t < +\infty$ et tout $R \leqq +\infty$, la formule (16).

Preuve. Choisissons un ensemble K_f de capacité nulle de sorte que f et ses dérivées premières soient continues hors de K_f (ce qui est possible parce que f est H^2_{loc}) et astreignons nous désormais à prendre $x_0 \notin K_f$. Soit $R < R' < +\infty$ fixés et tel que $x_0 \in B(0, R)$ et soit $(f_k)_k$ une suite de fonctions de classe C^2 à support compact convergente au sens H^2 vers f dans la boule $B(O, R')$ et telle que $f_k(x_0)$ converge vers $f(x_0)$. La formule de Itô appliquée à f_k donne:

$$f_k(X_\omega(t \wedge T_R)) = f_k(x_0) + \int_0^{t\wedge T_R} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_k}{\partial x_i}(X_\omega(s))\, dX^i_\omega(s) + \tfrac{1}{2} \int_0^{t\wedge T_R} (\Delta f_k)(X_\omega(s))\, ds \tag{17}$$

(voir [6]). Examinons chacun des termes de (17). On a alors

$$\begin{aligned} |E_{x_0}(f_k(X_\omega(t \wedge T_R)) - f(X_\omega(t \wedge T_R)))|^2 &\leqq E_{x_0}(\mathbb{1}_{\{t<T_R\}} |f_k(X\ (t)) - f(X_\omega(t))|^2) \\ &\quad + E_{x_0}(\mathbb{1}_{\{t \geqq T_R\}} |f_k(X_\omega(T_R)) - f(X_\omega(T_R))|^2) \\ &\leqq \int_{B(O,R)} p^{(R)}_t(x_0, x) |f_k(x) - f(x)|^2\, dx \\ &\quad + \int_{\partial B(O,R)} |f_k(x) - f(x)|^2\, d\mu^{(R)}_{x_0}(x) \end{aligned} \tag{18}$$

où $p^{(R)}_t(x_0, x)$ est le noyau de la chaleur de $B(O, R)$ avec condition initiales $\delta_{x_0}(x)$ et conditions au bord 0 et $d\mu^{(R)}_{x_0}(x)$ est la mesure harmonique de x_0 sur $\partial B(O, R)$ au point x. Comme le noyau de la chaleur opère de $L^2(B(O, R))$ dans $L^2(B(O, R))$, le premier terme du 2$^{\mathrm{nd}}$ membre de (18) tend vers 0 si $k \to +\infty$. D'autre part $d\mu^{(R)}_{x_0}(x)$ est équivalente à la mesure superficielle de $\partial B(O, R)$. Le théorème de trace de Sobolev, implique donc que le second terme du 2$^{\mathrm{nd}}$ membre de (18) tend aussi vers 0 si $k \to +\infty$. De même, les propriétés du second moment des intégrales stochastiques donnent:

$$\begin{aligned} &\left| E_{x_0}\left(\int_0^{t\wedge T_R} \sum \frac{\partial f_k}{\partial x_i}(X_\omega(s))\, dX^i_\omega(s) - \int_0^{t\wedge T_R} \sum \frac{\partial f_k}{\partial x_i}(X_\omega(s))\, dX^i_\omega(s) \right) \right|^2 \\ &\leqq E_{x_0}\left(\int_0^{T_R} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f_k}{\partial x_i}(X_\omega(s)) - \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_\omega(s)) \right|^2 ds \right) \\ &= \int_{B(O,R)} g^{(R)}(X_0, X) \left(\sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f_k}{\partial x_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|^2 \right) dx. \end{aligned} \tag{19}$$

où $g^{(R)}(x_0, x)$ est la fonction de Green de la boule $B(O, R)$. Comme les dérivées premières $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ convergent vers $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ au sens L^2 et que $g^{(R)}$ opère continûment de L^2 dans L^2, le dernier membre de (19) tend vers 0 dans $L^2(B(O, R))$, donc pour presque tout x_0, le premier membre de (19) tend vers 0.

De la même façon

$$\left| E_{x_0}\left(\int_0^{t\wedge T_R} (\Delta f)(X_\omega(s))\, ds - \int_0^{t\wedge T_R} (\Delta f_k)(X_\omega(s))\, ds \right) \right|^2 \to 0 \tag{20}$$

pour presque tout x_0.

Il existe donc finalement un ensemble E_f de mesure nulle tel que si $x_0 \notin E_f$, chaque terme de l'égalité (17) tend vers le terme correspondant de (16) dans $L^2(\Omega, P_{x_0})$. En particulier, soit R_n tendant vers $+\infty$; pour tout t, on a P_{x_0}-presque sûrement, pour tout n, l'égalité (16) avec R_n au lieu de R. Mais pour ω fixée, P_{x_0}-presque sûrement $T_{R_n}(\omega) \to +\infty$ et donc (16) est vrai si $R = +\infty$.

Supposons maintenant Δf bornée localement. Il en résulte que les dérivées premières de f le sont aussi. Reprenons (19); comme l'opérateur de Green des boules opère de L^∞ dans L^∞, le premier membre de (19) tend vers 0 pour tout $x_0 \notin K_f$. De même pour (20).

Par suite on a pour tout $x_0 \notin K_f$, P_{x_0}-presque sûrement, pour tout R_n, tout t rationnel, la formule (16). Or partant de x_0, $X_\omega(t)$ ne rencontre pas K_f (qui est de capacité nulle). Donc les variables aléatoires $f(X_\omega(t))$ et $\int_0^t \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_\omega(s))\,dX^i(s)$ sont continues en t, P_{x_0}-presque sûrement. Si de plus Δf est borné, $\int_0^t (\Delta f)(X_\omega(s))\,ds$ est continue en t. Par conséquent, on peut échanger le «P_{x_0}-presque sûrement» et le «pour tout t».

Démontrons maintenant une formule du type de Dynkin. On a d'abord:

Lemme 8. *Soit f une fonction de classe C^2 dans $\mathbb{R}^n$, W fonction continue dans $\mathbb{R}^n$. On a pour P_{x_0}-presque sûrement, pour $0 < s < t$,*

$$\exp\left(-\int_0^t W(X_u)\,du\right) f(X_t) - \exp\left(-\int_0^s W(X_u)\right) f(X_s)$$
$$= \int_0^t \exp\left(-\int_0^u W(X_r)\,dr\right) \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_u)\,dX_u^i + \int_s^t \exp\left(-\int_0^u W(X_r)\,dr\right)(gf)(X_u)\,du \quad (21)$$

où $gf = \frac{1}{2}\Delta f - Wf$.

Preuve. Soit $Y_t = \exp\left(-\int_0^t W(X_u)\,du\right) f(X_t)$.

C'est un processus stochastique tel que $Y_{t\wedge T_R}$ est de carré intégrable. On peut calculer ses invariants de Itô

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{E(Y_{(t+\varepsilon)\wedge T_R} - Y_{t\wedge T_R} | \mathscr{B}_{t\wedge T_R})}{\varepsilon} = M_{t\wedge T_R}$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{E((Y_{(t+\varepsilon)\wedge T_R} - Y_{t\wedge T_R} - M_{t\wedge T_R})^2 | \mathscr{B}_{t\wedge T_R})}{\varepsilon} = N_{t\wedge T_R}.$$

Pour cela on écrit en utilisant un développement limité de l'exponentielle et la formule de Itô pour f

$$Y_{(t+\varepsilon)\wedge T_R} = \exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_u)\,du\right)\left(1 - \int_{t\wedge T_R}^{(t+\varepsilon)\wedge T_R} W(X_s)\,ds + O(\varepsilon)\right)$$
$$\cdot\left(f(X_{t\wedge T_R}) + \int_{t\wedge T_R}^{(t+\varepsilon)\wedge T_R} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_\omega(s))\,dX_\omega^i(s)\right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\int_{t\wedge T_R}^{(t+\varepsilon)\wedge T_R} (\Delta f)(X_\omega(s))\,ds\right)$$

(où on a utilisé que W est continue) un raisonnement de routine montre que l'on a la première limite avec $M_{t\wedge T_R}=(gf)(X_{t\wedge T_R})\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_s)ds\right)$. On raisonne de même pour la seconde.

Alors on conclut:

Lemme 9. *Soit f une fonction de $H^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$, W une fonction continue. Il existe un ensemble E_f de mesure nulle tel que pour tout $x_0\notin E_f$, tout $R<+\infty$, tout t, on ait*

$$f(x_0)=E_{x_0}\left(\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_u)du\right) f(X_{t\wedge T_R})\right)$$
$$+E_{x_0}\left(\int_0^{t\wedge T_R}\exp\left(-\int_0^s W(X_u)du\right)(gf)(X_s)ds\right).$$

Preuve. Appliquons la formule (21) avec $s=0$ et $t\wedge T_R$ au lieu de t à une suite f_k de fonctions C^2 qui tend vers f au sens H^2 sur $B(O,R')$ $(R'>R)$ avec en plus $f_k(x_0)\to f(x_0)$. On voit qu'on peut prendre les espérances dans (21) de sorte qu'on a la formule (22) avec f_k au lieu de f. On a alors

$$\left|E_{x_0}\left(\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_u)du\right)(f_k(X_{t\wedge T_R}))-f(X_{t\wedge T_R}))\right|^2$$
$$\leqq K_{R,t}E_{x_0}(|f_k(X_{t\wedge T_R})-f(X_{t\wedge T_R})|^2)$$

et le second membre tend vers 0 si $k\to+\infty$ par le même raisonnement qu'au lemme 7. De même

$$\left|E_{x_0}\left(\int_0^{t\wedge T_R}\exp\left(-\int_0^s W(X_u)du\right)(gf_k(X_s)-gf(X_s))ds\right)\right|^2\to 0$$

chaque terme de la relation (22) écrit pour f_k au lieu de f converge donc vers le terme correspondant de (22), d'où le lemme 9.

Démontrons enfin:

Lemme 10. *Soit f une fonction $H^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$, W une fonction L^∞_{loc}. Alors le lemme 9 subsiste.*

Preuve. Soit toujours $R'>R$ et W_k suite de fonctions continues qui converge dans $L^p(B,O,R')$ vers W en restant bornées uniformément. On peut appliquer la formule (22) du lemme 9 aux W_k au lieu de W. Dans ces conditions il suffit de montrer que chacun des termes de la formule (22) avec W_k au lieu de W converge vers le terme correspondant. Par exemple, on a:

$$\left|E_{x_0}\left(\left(\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W_k(X_u)du\right)-\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_u)du\right)\right)f(X_{t\wedge T_R})\right)\right|^2$$
$$\leqq E_{x_0}(|f|^2(X_{t\wedge T_R}))E_{x_0}\left(\left(\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W_k(X_u)du\right)\right)-\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} W(X_u)du\right)^2\right).$$

La première espérance est finie car f est H^2_{loc} (voir preuve du lemme 7). La quantité sous le signe E_{x_0} converge preque sûrement vers 0 et est dominé par une quantité bornée, donc la seconde espérance tend vers 0.

4. Critère d'inexistence absolue d'états liés et propriétés des fonctions propres de $-\frac{1}{2}\Delta+V$

En général, l'étude des fonctions propres de carré intégrable de l'opérateur $-\frac{1}{2}\Delta+V$ se fait en référence à une extension autoadjointe fixée de $-\frac{1}{2}\Delta+V$; en fait, on fixe une extension autoadjointe H de $-\frac{1}{2}\Delta+V$ a priori (par exemple celle définie par une somme de formes quadratiques) et on étudie les valeurs propres et fonctions propres de H, c'est-à-dire celles qui appartiennent a priori au domaine de H; dans le cas de l'extension autoadjointe définie par la somme des formes quadratiques, l'estimée de la première valeur propre se fait par la formule de Rayleigh-Ritz (voir par exemple [2, 7]). Dans [1] sont obtenus un critère d'absence d'états liés relativement à l'extension de Feynman-Kac de $-\frac{1}{2}\Delta+V$.

Remarquons d'abord que *si on prend une extension autoadjointe $\mathscr{H}$ de $-\frac{1}{2}\Delta+V$ défini sur les fonctions C^∞ à support compact, et si ψ est fonction propre L^2 de*

$$\mathscr{H}\psi=\lambda\psi$$

alors l'équation

$$(-\tfrac{1}{2}\Delta+V)\psi=\lambda\psi$$

a lieu au sens de distributions. En effet si φ est C^∞ à support compact, on a

$$(\mathscr{H}\psi|\varphi)_{L^2}=(\psi|\mathscr{H}\varphi)_{L^2}=(\psi|(-\tfrac{1}{2}\Delta+V)\varphi).$$

Par suite, lorsqu'on peut démontrer l'absence d'états liés de façon absolue, i.e. au sens des distributions, cela implique a fortiori l'absence d'états liés dans toute extension autoadjointe de $-\frac{1}{2}\Delta+V$ défini sur les fonctions C^∞ à support compact.

C'est ce que nous allons faire en supposant V fonction localement bornée. De plus nous donnerons quelques propriétés de fonctions propres.

Théorème 2. *Supposons réalisées les hypothèses suivantes*

i) *V est localement bornée.*

ii) $2\max\limits_{x\in\mathbb{R}^n}(GV^-)(x)<1$.

iii) *ψ est fonction de $L^2(\mathbb{R}^n)$ satisfaisant l'équation suivante au sens des distributions.*

$$-\tfrac{1}{2}\Delta\psi+V\psi=\lambda\psi. \tag{23}$$

Alors nécessairement λ est positif et pour presque tout $x\in\mathbb{R}^n$ tout $0\leqq t<+\infty$, on a

$$(P_t\psi)(x)=e^{-\lambda t}\psi(x). \tag{24}$$

En particulier si de plus V est dans $L^p(\mathbb{R}^n)$, ψ est dans le domaine du générateur infinitésimal de Feynman Kac et lorsque $p\geqq 2$, il est dans le domaine de l'extension autoadjointe de $-\frac{1}{2}\Delta+V$ défini par la somme des formes quadratiques comme au 2.

En particulier dans ces cas, le système n'a pas d'états liés de façon absolue.

Démonstration. Posons $W = -V + \lambda$ [le λ est celui de l'équation (23)]. Les estimées elliptiques classiques nous disent que si $f \in L^2$, on a

$$\|f\|_{H^2_{\mathrm{loc}}} \leqq A(\|\Delta f\|_{L^2_{\mathrm{loc}}} + \|f\|_{L^2_{\mathrm{loc}}}).$$

En particulier ici ψ est H^2_{loc} car ψ est dans L^2 et satisfait l'équation (23), comme V est localement bornée ψ est dans H^2_{loc}. Le lemme 10 nous donne

$$\psi(x) = E_x\left(\exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} \tilde{V}(X_u)du\right)\psi(X_{t\wedge T_R})\right) \tag{25}$$

ou $\tilde{V} = V - \lambda$ sauf pour les x d'un ensemble E_ψ de mesure nulle, donc certainement presque partout. Il nous suffit de montrer qu'on peut passer à la limite pour $R \to +\infty$ pour déduire de (25) que $\psi(x) = e^{\lambda t}(P_t\psi)(x)$.

Posons

$$A_t^{(R)} = \exp\left(-\int_0^{t\wedge T_R} \tilde{V}(X_u)du\right)\psi(X_{t\wedge T_R}) \tag{26}$$

de sorte que si $R \to +\infty$, A_t^R tend vers A_t,

$$A_t = \exp\left(-\int_0^t \tilde{V}(X_u)du\right)\psi(X_t).$$

On va montrer qu'il existe une suite $R_n \to +\infty$ telle que $(A_t^{(R_n)})_n$ est uniformément intégrable, en montrant que $(|A_t^{(R_n)}|^\alpha)_n$ est une famille bornée de $L^\alpha(\Omega, P_x)$ pour un $\alpha > 1$. Cela impliquera que $\lim\limits_{R_n \to +\infty} E_x(A_t^{(R_n)}) = E_x(A_t) = \psi(x)$ et donc on déduira que $\lambda \geqq 0$ du corollaire des lemmes 1–4. Pour obtenir cette estimée, nous pouvons toujours laisser de côté la partie positive V^+ de V qui ne fait qu'améliorer les affaires. Nous avons, en posant $\tilde{V}^- = V^- + \lambda$

$$\begin{aligned} A_t^{(R)} &= \exp\left(\int_0^t \tilde{V}^-(X_u)du\right)\psi(X_t)\mathbb{1}_{\{t<T_R\}} \\ &\quad + \exp\left(\int_0^{T_R} \tilde{V}^-(X_u)du\right)\psi(X_{T_R})\mathbb{1}_{\{t\geqq T_R\}} \\ &\equiv B_t^{(R)} + C_t^{(R)}. \end{aligned} \tag{27}$$

Regardons

$$E_x(|B_t^{(R)}|^2) \leqq E_x\left(\exp\left(2\int_0^t V^-(X_u)du\right)|\psi|^2(X_t)\right)e^{2\lambda t}. \tag{28}$$

L'hypothèse ii)

$$\max|GV^-(x)| < \tfrac{1}{2}$$

assure que $\alpha_2^-(t) \leqq C$ pour tout t et le lemme 2 nous dit que le second membre de (28) est donc fonction $L^1(\mathbb{R}^n)$ par rapport à x de sorte que t étant fixé, pour presque tout x,

$$E_x((B_t^{(R)})^2) \leqq C_{t,x} < +\infty \tag{29}$$

où $C_{t,x}$ est constante indépendante de R. Regardons ensuite pour $1<\alpha<2$ à déterminer ultérieurement

$$\begin{aligned} E_x(|C_t^{(R)}|^\alpha) &= E_x\left(\exp\left(\alpha \int_0^{T_R} V^-(X_u)\,du\right) |\psi|^\alpha(X_{T_R})\right) e^{\alpha\lambda t} \\ &\leqq \left[E_x\left(\exp\left(\frac{2\alpha}{2-\alpha} \int_0^{+\infty} V^-(X_u)\,du\right)\right)\right]^{\frac{2-\alpha}{2}} [E_x(|\psi|^2(X_{T_R}))]^{\frac{\alpha}{2}} e^{\alpha\lambda t}. \end{aligned} \tag{30}$$

Choisissons $1<\alpha<2$ assez petit tel que

$$\frac{2\alpha}{2-\alpha} \max_{x\in\mathbb{R}^n}(GV^-)(x) < 1$$

ce qui est possible par l'hypothèse ii).

Il résulte alors du théorème 2 de [1] que

$$E_x\left(\exp\left(\frac{2\alpha}{2-\alpha} \int_0^{+\infty} V^-(X_u)\,du\right)\right) \leqq C'$$

C' indépendant de x. D'autre part $E_x(|\psi|^2(X_{T_R}))$ est la moyenne de $|\psi|^2$ sur la sphère de centre 0 et de rayon R. Comme $|\psi|^2$ est intégrable, il existe une suite $R_n \to +\infty$ avec $E_x(|\psi|^2(X_{T_{R_n}})) \leqq C''$ pour tout n, d'où

$$E_x(|C_t^{(R_n)}|^\alpha) \leqq K \quad \text{pour tout } n. \tag{31}$$

Les inégalités (29) et (31) concluent à l'uniforme intégrabilité de $(A_t^{(R_n)})_n$ ce qui démontre que pour tout t, pour presque tout x,

$$\psi(x) = e^{\lambda t}(P_t\psi)(x)$$

et achève ainsi la première partie du théorème 2. Le reste du théorème 2 découle du théorème 1 et de la première partie.

Remarque. Dand le théorème 2, la constante de couplage est divisée par 2 [hypothèse ii)] par rapport au résultat de [1] (théorème 2).

Remerciement. Je remercie Monsieur Paul Malliavin de m'avoir suggéré le problème de la non existence d'états liés indépendamment de la donnée d'une extension autoadjointe particulière.

Bibliographie

1. Berthier, A.M., Gaveau, B.: Critère de convergence des fonctionnelles de Kac et applications en mécanique quantique et en géométrie. J. Funct. Anal. **30**, 310 (1978)
2. Glaser, V., Martin, A., Grosse, H., Thirring, W.: A family of optimal conditions for the absence of bound states. Symposium in honor of V. Bargman. Princeton U. p. 169–194 (1976)

3. Kac, M.: On some connections between probability and differential equations. 2nd Berkeley Symposium on probability and statistics 1950
4. Kato, T.: Math. Ann. **162**, 258 (1966)
5. Klein, A., Laudau, F.: J. Funct. Anal. **20** (1975)
6. McKean, H.: Stochastic integrals. New York: Academic Press 1969
7. Simon, B.: On the number of bound states of two body Schrödinger equations: a review. Symposium in honor of V. Bargmann. Princeton (1976)
8. Vauthier, J.: À paraître

Transmis par J. Glimm

Reçu le 27 février 1979