Résolution de l'équation de Schrödinger

Perrine Jouteur

Ce développement est un peu ambitieux, il demande une solide préparation (du moins il m'a demandé des efforts pour le maîtriser de A à Z). Il se place dans les leçons 222, 228, 239 et 250, et utilise les livres *Cours d'analyse, théorie des distributions et analyse de Fourier* de Bony et *Distributions, analyse de Fourier et équations aux dérivées partielles* de Golse.

Remarque 0.1 On adoptera la convention suivante pour les transformations de Fourier : si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, on pose

$$\hat{f}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-i<x,\xi>} dx.$$

Si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ et $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, la formule d'inversion de Fourier s'écrit alors :

$$\text{p.p.}x,\ f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\xi) e^{i<x,\xi>} d\xi.$$

De même, avec les hypothèses adéquates, on a :

$$\partial_{\xi_i} \mathcal{F}(f) = \mathcal{F}(-ix_i f) \text{ et } \mathcal{F}(\partial_{x_i} f) = i\xi \mathcal{F}(f).$$

Définition 0.1 Équation élémentaire de Schrödinger
Une solution élémentaire de l'opérateur de Schrödinger est une distribution E de $S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, solution de :

$$\begin{cases} i\partial_t E + \frac{1}{2}\Delta_x E = i\delta_{(0,0)} \\ \operatorname{supp} E \subset \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n \end{cases}.$$

Remarque 0.2 Lien avec l'équation de Schrödinger classique.
L'équation que l'on étudie ici est en fait l'équation de Schrödinger libre, qui s'écrit :

$$\begin{cases} i\partial_t \psi + \frac{1}{2}\Delta_x \psi = 0 \quad \text{où } t > 0,\ x \in \mathbb{R}^n \\ \psi|_{t=0} = \psi_{initiale} \end{cases}.$$

En effet, supposons que la condition initiale $\psi_{initiale}$ soit de classe $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$. Alors étant donnée E une distribution tempérée solution élémentaire de l'opérateur de Schrödinger, la distribution définie par $T := E \star (\delta_0 \otimes \psi_{initiale})$ est solution dans S' du problème suivant :

$$\begin{cases} i\partial_t T + \frac{1}{2}\Delta_x T = \delta_0 \otimes \psi_{initiale} \\ \operatorname{supp} T \subset \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n \end{cases}.$$

Ceci signifie que T coïncide sur $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n$ avec l'unique solution au sens classique de l'équation de Schrödinger. (cf Golse page 248).

On voit que les conditions sur le support des solutions recherchées ne sont pas innocentes, elles garantissent l'unicité de la solution élémentaire. On aura besoin notamment du lemme suivant.

Lemme 0.1 Il existe une unique solution dans $S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ du problème

$$\begin{cases} \partial_t T = 0 \\ \operatorname{supp} T \subset \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n \end{cases}.$$

Il s'agit de la distribution nulle.

Démonstration
Soit $T \in S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ une solution. Alors pour tout $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, on a $< \tilde{T}, t\phi >= 0$.
Comme $\operatorname{supp} T \subset \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n$, on peut trouver un voisinage V de 0 dans $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^n$ disjoint du support de T. Soit alors χ une fonction plateau sur ce voisinage, i.e. telle que $\chi(0) = 1$ et $\operatorname{supp} \chi \subset V$.
Soit $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$. La fonction $\phi_1 : (t, x) \mapsto \phi(t, x) - \chi(t, x)\phi(0, x)$ est une fonction dans $C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, qui de plus vérifie $\forall x \in \mathbb{R}^n, \phi_1(0, x) = 0$. Ainsi il existe une fonction $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ telle que $\phi_1 = t\psi$.
Donc :

$$< T, \phi >=< T, \chi\phi(0, \cdot) >= 0.$$

La dernière égalité vient du fait que le support de χ est dans le complémentaire du support de T. D'où le résultat. ■

Théorème 0.1 L'opérateur de Schrödinger admet une unique solution élémentaire E dans $S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ (l'unicité vient de la condition sur le support). De plus, cette solution s'obtient comme limite (dans S') de fonctions localement intégrables :

$$E^\epsilon(t, x) := \frac{e^{-\frac{\|x\|^2}{2(\epsilon+i)t}}}{\sqrt{2\pi(\epsilon + i)t}^n} 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) \underset{\epsilon \to 0}{\longrightarrow} E \text{ dans } S'.$$

Enfin, on peut tout de même exprimer cette solution en termes explicites : pour toute fonction test $\phi \in S(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, on a :

$$< E, \phi >= \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\frac{i\pi n}{4}}}{\sqrt{2\pi t}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \phi(t, x) e^{-\frac{\|x\|^2}{2it}} dx dt.$$

Démonstration
• Procédons d'abord par analyse-synthèse. Soit $E \in S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ une solution élémentaire. Appliquons la transformée de Fourier partielle en x à l'équation élémentaire de Schrödinger (on note $\mathcal{F}_x(E) =: \tilde{E}$) :

$$i\partial_t \tilde{E} - \frac{1}{2} \|\xi\|^2 \tilde{E} = i\tilde{\delta_0} = i\delta_0 \otimes 1.$$

Multiplions cette égalité par la fonction C^∞ bornée $(t, \xi) \mapsto e^{i\frac{t}{2}\|\xi\|^2}$, et remarquons la formule de Leibniz :

$$\partial_t \left(e^{i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \tilde{E} \right) = \partial_t (H \otimes 1).$$

Ainsi, dans S', on a

$$\partial_t \left(e^{i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \tilde{E} - H \otimes 1 \right) = 0.$$

D'après le lemme 1, on obtient finalement :

$$e^{i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \tilde{E} = H \otimes 1 \text{ dans } S'.$$

Puis $\tilde{E} = (H \otimes 1)e^{i\frac{t}{2}\|\xi\|^2}$, et enfin

$$\tilde{E} = 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2}.$$

Synthèse : la fonction $\tilde{E}$ définie comme ci-dessus est une fonction mesurable et bornée sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ donc elle définie bien une distribution tempérée. En prenant sa transformée de Fourier partielle inverse, on obtient une distribution $E \in S'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ qui est bien solution de l'équation élémentaire de Schrödinger d'après les calculs précédents.

• Essayons à présent de connaître mieux cette solution E. Pour cela, on va montrer que $\tilde{E}$ est limite dans S' d'une suite de fonctions intégrables. Par continuité de la transformée de Fourier partielle inverse, on en déduira que E est limite dans S' de la suite des transformées de Fourier partielles de ces fonctions.

Lemme 0.2 Soit $z \in \mathbb{C}$ non nul, avec $Re(z) \geqslant 0$. Considérons la fonction $G_z(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi z}^n} e^{-\frac{1}{2z}\|x\|^2}$ (on a choisi la détermination principale de la racine carrée).
Alors G_z est bornée sur $\mathbb{R}^n$ (en fait, elle est intégrable dès que $Re(z) > 0$, et elle est seulement bornée quand $Re(z) = 0$), donc elle définit une distribution tempérée, et on a

$$\hat{G}_z(\xi) = e^{-\frac{1}{2}z\|\xi\|^2}.$$

Démonstration (du lemme 2)
Remarquons que pour tout $i \in [\![1,n]\!]$,

$$\partial_i G_z(x) = \frac{-x_i}{z} G_z(x).$$

D'où, en passant à la transformée de Fourier,

$$i\xi_i \hat{G}_z(\xi) = \frac{1}{zi}\partial_i \hat{G}_z(\xi).$$

Et ainsi il existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tel que

$$\hat{G}_z(\xi) = \alpha e^{-\frac{z}{2}\|\xi\|^2}.$$

Si $Re(z) > 0$, alors G_z est intégrable et donc on peut utiliser la formule usuelle pour trouver α :

$$\alpha e^{\frac{z}{2}\|\xi\|^2} = \int_{\mathbb{R}^n} G_z(x) e^{-i<x,\xi>} dx.$$

On évalue en $\xi = 0$, et alors

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi z}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{1}{2z}\|x\|^2} dx = 1.$$

La dernière égalité est laissée en lemme, et se démontre par théorème des résidus.

Si $Re(z) = 0$, on procède en évaluant la distribution tempérée $\hat{G}_z$ contre une fonction test ϕ bien choisie (de la forme $e^{-\frac{|x|^2}{2}}$), et en utilisant la dualité $\langle \hat{G}_z, \phi \rangle = \langle G_z, \hat{\phi} \rangle$. Bref, après quelques calculs d'intégrales, on finit par obtenir que $\alpha = 1$. ■

• Retournons à la preuve principale. Soit $(\epsilon_k)_k$ une suite de réels strictement positifs qui converge vers 0. Notons de plus, pour tout $k \in \mathbb{N}$, $E_k(t,x) := 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) G_{(\epsilon_k+i)t}(x)$. La suite de fonctions $(E_k)_k$ est bien définie, dans S' (car intégrables, même en t grâce à l'exponentielle), et de plus pour tout $k \in \mathbb{N}$, d'après le lemme on a

$$\tilde{E}_k(t,\xi) = 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) e^{-\frac{1}{2}(\epsilon_k+i)t\|\xi\|^2}.$$

Par continuité de l'exponentielle, la suite de fonction $(\tilde{E}_k)_k$ converge simplement vers $\tilde{E}$. De plus, pour tout $k \in \mathbb{N}$, pour tout $\xi \in \mathbb{R}^n$,

$$\left| e^{-\frac{1}{2}(\epsilon_k+i)t\|\xi\|^2} \right| = e^{-\frac{1}{2}\epsilon_k t\|\xi\|^2}.$$

Ainsi, pour $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, de support inclus dans $[-\tau,\tau] \times [-R,R]^n$, on a

$$\left| e^{-\frac{1}{2}(\epsilon_k+i)t\|\xi\|^2} \phi(t,\xi) \right| \leqslant \|\phi\|_\infty \, 1_{[-\tau,\tau]\times[-R,R]^n}(t,\xi).$$

Par théorème de convergence dominée, on en conclut que $\tilde{E}_k \underset{k\to+\infty}{\longrightarrow} \tilde{E}$, dans S'. D'où le résultat annoncé sur les fonctions E_k, par continuité de la transformée de Fourier inverse.

• Pour finir, montrons l'assertion sur la formule explicite pour E. Soit $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$.
On a, par dualité :

$$< E, \tilde{\phi} > = < \tilde{E}, \phi > = \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n} 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \phi(t,\xi) dt d\xi.$$

Par théorème de Fubini, comme la fonction $(t,\xi) \mapsto 1_{\mathbb{R}_+^*}(t) e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2}\phi(t,\xi)$ est intégrable sur $\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n$, on peut séparer les intégrales

$$< E, \tilde{\phi} > = \int_0^{+\infty} \left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \phi(t,\xi) d\xi \right) dt.$$

Fixons alors $t > 0$. On note $\psi_t : \xi \mapsto \phi(t,\xi)$, définie sur $\mathbb{R}^n$. La fonction ψ_t est de classe C^∞ et est à support compact. On peut alors réécrire ce qui est à l'intérieur de la parenthèse, en terme de distributions tempérées :

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2} \phi(t,\xi) d\xi = < \hat{G}_{it}, \psi_t > = < G_{it}, \hat{\psi}_t > .$$

Or la transformée de Fourier de ψ_t est justement la transformée de Fourier partielle en ξ de ϕ, d'où

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\frac{t}{2}\|\xi\|^2}\phi(t,\xi)d\xi =< G_{it}, \tilde{\phi}(t,\cdot) >= \int_{\mathbb{R}^n} G_{it}(x)\tilde{\phi}(t,x)dx.$$

Puis,

$$< E, \tilde{\phi} >= \int_0^{+\infty}\int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{\sqrt{2\pi t}^n} e^{-\frac{1}{2t}\|x\|^2}\tilde{\phi}(t,x)dx\ dt.$$

Malheureusement, on ne peut pas appliquer un théorème de Fubini pour rassembler les intégrales, car la fonction à l'intérieur n'est pas intégrable. ∎