Solution élémentaire de l'équation de Schrödinger

Références : Bony, *Cours d'analyse - Théorie des distributions et analyse de Fourier*, p 187-189 + p 150
Zuily, *Éléments de distributions et d'équations aux dérivées partielles*, p 115 + p 108-109

Théorème.

L'équation de Schrödinger possède une solution élémentaire tempérée à support dans $\{t \geqslant 0\}$. Il s'agit de la distribution E donnée par :

$$\forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n), \quad \langle E, \varphi\rangle = e^{-in\pi/4} \int_0^\infty \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\|x\|^2/4t} \varphi(t,x)\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}t.$$

Démonstration. • Analyse
Supposons que E soit solution de

$$\partial_t E - i\Delta_x E = \delta_0.$$

On applique la transformée de Fourier partielle à cette équation pour obtenir

$$\partial_t \widetilde{E} + i\left\|x\right\|^2 \widetilde{E} = \widetilde{\delta_0}.$$

Explicitons $\widetilde{\delta_0}$:

$$\langle \widetilde{\delta_0}, \varphi\rangle = \langle \delta_0, \widetilde{\varphi}\rangle = \widetilde{\varphi}(0,0) = \int_{\mathbb{R}^n} \varphi(0,x)\mathrm{d}x.$$

On est tenté de poser comme solution

$$E = \widetilde{\mathcal{F}}^{-1}\left(H(t) e^{-it\|\xi\|^2} \right).$$

Ainsi le H permettra d'obtenir le dirac en dérivant avec la formule des sauts et l'exponentielle vérifiera l'équation.

• Synthèse
Posons E comme précédemment. On a alors pour $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$,

$$\begin{aligned}
\langle \partial_t E - i\Delta_x E, \widetilde{\varphi}\rangle &= \langle \partial_t \widetilde{E} + i\left\|x\right\|^2 \widetilde{E}, \varphi\rangle \\
&= \langle \widetilde{E}, -\partial_t\varphi + i\left\|x\right\|^2 \varphi\rangle \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\int_0^\infty e^{-it\|x\|^2}\left(-\partial_t\varphi(t,x) + i\left\|x\right\|^2\varphi(t,x)\right)\mathrm{d}t\mathrm{d}x \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \left[-e^{-it\|x\|^2}\varphi(t,x)\right]_0^\infty \mathrm{d}x \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \varphi(0,x)\mathrm{d}x \\
&= \langle \delta_0, \widetilde{\varphi}\rangle.
\end{aligned}$$

On a donc bien, comme la transformée de Fourier partielle est une bijection sur $\mathcal{S}$ [1],

$$\partial_t E - i\Delta_x E = \delta_0.$$

• Explicitons la distribution E.
On a posé

$$\widetilde{E} = H(t)e^{-it\|\xi\|^2}.$$

Donc en appliquant la transformée de Fourier, on a

$$\check{E} = \frac{1}{(2\pi)^n} H(t)\widetilde{\mathcal{F}}\left(e^{-it\|\xi\|^2}\right).$$

On a à présent besoin d'un lemme.

1. On n'oublie surtout pas de le mettre dans le plan ! Ce n'est pas une chose évidente !

Lemme.

On a pour $t \in \mathbb{R}^{+*}$,

$$\mathcal{F}\left(e^{-it\|\xi\|^2}\right) = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right)^n e^{i\frac{\|x\|^2}{4t}}.$$

Si on a ce lemme, alors

$$\check{E} = \frac{1}{(2\pi)^n}H(t)\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right)^n e^{i\frac{\|x\|^2}{4t}}.$$

Or pour $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$, on a

$$\begin{aligned}
\langle E, \varphi\rangle &= \langle \check{E}, \check{\varphi}\rangle \\
&= e^{-in\pi/4}\int_0^\infty \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}}\left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\|x\|^2/4t}\varphi(t,-x)\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}t \\
&= e^{-in\pi/4}\int_0^\infty \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}}\left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\|x\|^2/4t}\varphi(t,x)\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

On en déduit donc le résultat :

$$E = \check{E} = \frac{H(t)}{(4\pi t)^{n/2}}e^{-i\frac{n\pi}{4}}e^{i\frac{\|x\|^2}{4t}}.$$

□

Passons à présent à la preuve du lemme.

Démonstration. On commence par fixer t.
La transformée de Fourier de $T = e^{-it\|\xi\|^2}$ est bien définie car c'est une fonction de L^∞, donc de $\mathcal{S}'$.
Néanmoins, comme elle n'est pas dans $\mathcal{S}$, on ne peut pas calculer simplement sa transformée de Fourier.

On se place à présent dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ et $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$.
On pose $T_\varepsilon = e^{-\varepsilon\|\xi\|^2}e^{-it\|\xi\|^2} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$.
Soit $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, alors par convergence dominée, on a

$$\langle T_\varepsilon, \varphi\rangle = \int e^{-\varepsilon\|\xi\|^2}e^{-it\|\xi\|^2}\varphi(\xi)\mathrm{d}\xi \underset{\varepsilon\to 0}{\to} \int e^{-it\|\xi\|^2}\varphi(\xi)\mathrm{d}\xi = \langle T, \varphi\rangle.$$

Donc $T_\varepsilon \to T$ dans $\mathcal{S}'$. Comme la transformée de Fourier est continue, il vient $\mathcal{F}T_\varepsilon \to \mathcal{F}T$ dans $\mathcal{S}'$.
Mais $T_\varepsilon \in \mathcal{S}$ et la transformée de Fourier sur $\mathcal{S}'$ n'est qu'un prolongement de celle sur $\mathcal{S}$. On en déduit

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}T_\varepsilon &= \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\varepsilon\|\xi\|^2}e^{-it\|\xi\|^2}e^{-i(x,\xi)}\mathrm{d}\xi \\
&= \prod_{j=1}^n \int_{\mathbb{R}} e^{-(\varepsilon+it)y^2}e^{-ix_jy}\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

On sait que si $z \in \mathbb{R}^{+*}$, alors

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-zy^2}e^{-ix_jy}\mathrm{d}y = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{z}}e^{-\frac{x_j^2}{4z}}.$$

En utilisant le théorème d'holomorphie sous le signe intégrale, on montre que $z \mapsto \int_{\mathbb{R}} e^{-zy^2}e^{-ix_jy}\mathrm{d}y$ se prolonge de manière holomorphe sur $\Re(z) > 0$. De même, $z \mapsto \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{z}}e^{-\frac{x_j^2}{4z}}$ se prolonge de manière holomorphe sur $\Re(z) > 0$ en utilisant une bonne détermination du logarithme.
Par principe de prolongement analytique, comme elles coïncident sur l'axe réel, on a

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-(\varepsilon+it)y^2}e^{-ix_jy}\mathrm{d}y = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\varepsilon+it}}e^{-\frac{x_j^2}{4(\varepsilon+it)}}.$$

Et enfin, il vient

$$\mathcal{F}T_\varepsilon = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\varepsilon+it}}\right)^n e^{-\frac{\|x\|^2}{4(\varepsilon+it)}}$$

D'une part, $\sqrt{\varepsilon + it} \to e^{i\frac{\pi}{4}}\sqrt{t}$. D'autre part, $e^{-\frac{\|x\|^2}{4(\varepsilon+it)}} \to e^{i\frac{\|x\|^2}{4t}}$ dans $\mathcal{S}'$ par convergence dominée (il suffit de l'écrire).

On a donc bien le résultat attendu

$$\mathcal{F}T = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right)^n e^{i\frac{\|x\|^2}{4t}}.$$

□

Théorème.

Si $A \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^n)$ est telle qu'il existe une solution élémentaire $E \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$, c'est à dire telle que $A*E = \delta$, alors pour tout $f \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^n)$, il existe au moins une solution à $A * u = f$.
De plus, il existe au plus une solution $u \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^n)$ et si elle existe, c'est $E * f$.

Démonstration. Comme les supports de A et f sont compacts, le produit de convolution suivant est défini et on peut utiliser l'associativité :

$$A * (E * f) = (A * E) * f = \delta * f = f.$$

On a donc une solution définie par $u = E * f$.
De plus, si on a une solution u à support compact, alors comme les supports de u et A sont compacts, on peut écrire

$$u = \delta * u = (A * E) * u = (E * A) * u = E * (A * u) = E * f.$$

Cela donne l'unicité. □

Comme $(\partial_t - i\Delta_x)\delta$ est une distribution à support compact, et comme $(\partial_t - i\Delta_x)\delta * u = \partial_t u - i\Delta_x u$ pour $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ [2], on peut appliquer notre théorème à l'équation de Schrödinger. On a ainsi pour tout $f \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^n)$ au moins une solution sur $\mathbb{R}^n$ à

$$\partial_t u - i\Delta_x u = f.$$

De plus, l'unique solution à support compact - si elle existe - est $E * f$.

Remarques : • Attention ! E n'est quasiment jamais à support compact ! Ce n'est pas parce que $u = E * f$ est compact que nécessairement E acquière aussi cette propriété.
• Il n'existe pas toujours de solution à support compact de $A*u = f$, par exemple si $f = \delta$, alors nécessairement, s'il existe une solution dans $\mathcal{E}'$, c'est E. Et on peut prouver que toute EDP à coefficients constants non tous nuls possède une infinité de solutions élémentaires et qu'elles ne sont **jamais** à support compact dès que l'ordre de l'équation vaut au moins 1.
• Et le lien avec la physique, où est-il ?
L'équation physique de Schrödinger est

$$H\psi = i\hbar\partial_t\psi.$$

ψ est la fonction d'onde d'une particule libre. Sa norme au carré est la densité de probabilité de la position de la particule.
H est l'hamiltonien du système. Il vérifie $H = \dfrac{\widehat{p}^2}{2m} + V$ avec $\widehat{p}$ la quantité de mouvement vectorielle et V le potentiel.
On peut démontrer que $\widehat{p} = -i\hbar\nabla_x$. Ainsi, à potentiel nul, on a une équation similaire à celle étudiée :

$$\partial_t\psi - i\hbar\Delta_x\psi = 0.$$

Pour des détails supplémentaires, le lecteur peut (ou pas) regarder le Claude Cohen-Tannoudji et le Basdevant, Dalibard, Joffre.
• Il n'est pas si clair que à t fixé,

$$\mathcal{F}\left(e^{-it\|\xi\|^2}\right) = \widetilde{\mathcal{F}}\left(e^{-it\|\xi\|^2}\right).$$

Pour une fonction de $\mathcal{S}$, c'est évident. Il suffit donc de passer la transformée de Fourier de l'autre côté du crochet et cela donne le résultat. (Merci à Léo Vivion pour cette remarque.)
• On peut appliquer le même raisonnement (mais c'est plus simple) pour trouver une solution élémentaire de l'équation de la chaleur. C'est la distribution

$$E(t,x) = H(t)(4\pi t)^{-n/2}e^{-\|x\|^2/4t}.$$

2. Bony, p 144-145