Équation de Schrödinger

Arnaud Girand

9 septembre 2013

Référence :
- [Zui02], p. 152–154

Prérequis :
- espaces $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$.

Commençons par conventionner[1] ; pour $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ on pose :

$$\overline{\mathcal{F}}v : x \mapsto \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle x,\xi\rangle}v(\xi)d\xi \text{ et } \widehat{v} := \mathcal{F}v : x \mapsto \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\langle x,\xi\rangle}v(\xi)$$

On a alors $\mathcal{F}\overline{\mathcal{F}} = \overline{\mathcal{F}}\mathcal{F} = \mathrm{id}_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}$. On étend ces deux opérateurs à $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ par le procédé standard $\langle Tg, \varphi\rangle := \langle g, T\varphi\rangle$.

Proposition 1
Soit $g \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$.
Alors il existe une unique solution $u = (u_t)_{t\in\mathbb{R}} \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$ au problème suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u - i\Delta u = 0 \text{ dans } \mathcal{D}'(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n) \\ u_0 = g \end{cases} \tag{1}$$

Démonstration :
- *Existence.* Pour $t \in \mathbb{R}$, posons $u_t := \overline{\mathcal{F}}(e^{-it\|\cdot\|^2}\widehat{g})$. Cette expression a un sens car $\widehat{g} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ et on a même $u_t \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$. De plus $u_0 = g$ et et on a bien $u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$.
De plus on a :

$$\begin{aligned}
\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n),\ \langle \partial_t u - i\Delta u, \psi\rangle &= -\langle u, \partial_t\psi - i\Delta\psi\rangle \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \langle u_t, \partial_t\psi(t,.) + i\Delta\psi(t,.)\rangle dt \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \langle \overline{\mathcal{F}}(e^{-it\|\cdot\|^2}\widehat{g}), \partial_t\psi(t,.) + i\Delta\psi(t,.)\rangle dt \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \langle e^{-it\|\cdot\|^2}\widehat{g}, \overline{\mathcal{F}}(\partial_t\psi(t,.) + i\Delta\psi(t,.))\rangle dt \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \langle e^{-it\|\cdot\|^2}\widehat{g}, (\partial_t - i\|.\|^2)(\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))\rangle dt \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \langle \widehat{g}, e^{-it\|\cdot\|^2}(\partial_t - i\|.\|^2)(\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))\rangle dt
\end{aligned}$$

Remarquons à présent que, pour tous $t \in \mathbb{R}$ et $\xi \in \mathbb{R}^n$:

$$\partial_t(e^{-it\|\xi\|^2}\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))(\xi)) = e^{-it\|\xi\|^2}((\partial_t - i\|\xi\|^2)\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))(\xi))$$

D'où :

$$\begin{aligned}
\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n),\ \langle \partial_t u - i\Delta u, \psi\rangle &= -\int_{\mathbb{R}} \langle \widehat{g}, \partial_t(e^{-it\|\cdot\|^2}\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.)))\rangle dt \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \partial_t\langle \widehat{g}, e^{-it\|\cdot\|^2}\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))\rangle dt \text{ par dérivation sous le signe intégral} \\
&= -\lim_{N\to\infty}[\langle \widehat{g}, e^{-it\|\cdot\|^2}\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))\rangle]_{t=-N}^{t=N}
\end{aligned}$$

1. Vous avez ma promesse qu'il n'y aura aucun dépassement d'honoraires.

Or, par passage à la limite sous le signe intégral on a :

$$\forall \xi \in \mathbb{R}, \quad \overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))(\xi) \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$$

Et donc un nouveau passage à la limite sous le signe intégral nous donne :

$$\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n),\ \langle \partial_t u - i\Delta u, \psi\rangle = \lim_{N\to\infty} [\langle \widehat{g}, e^{-it\|\cdot\|^2}\overline{\mathcal{F}}(\psi(t,.))\rangle]_{t=-N}^{t=N} = 0$$

Ainsi, u est bien une solution du problème (1).

– *Unicité.* Commençons par remarquer que la différence de deux solutions de (1) est une solution $u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ du problème suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u - i\Delta u = 0 \text{ dans } \mathcal{D}'(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n) \\ u_0 = 0 \end{cases} \tag{2}$$

Montrer l'unicité de la solution au problème (1) revient donc à montrer que 0 est l'unique solution du problème (2). Soit donc u une solution de (2) ; on a alors :

$$\begin{aligned} \forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n),\ 0 &= \langle \partial_t u - i\Delta u, \psi\rangle \\ &= -\langle u, (\partial_t + \Delta)\psi\rangle \\ &= -\int_{\mathbb{R}} \langle u_t, (\partial_t+\Delta)\psi(t,.)\rangle dt \\ &= -\int_{\mathbb{R}} \langle u_t, \partial_t\psi(t,.)\rangle dt - \int_{\mathbb{R}} \langle u_t, \Delta\psi(t,.)\rangle dt \end{aligned}$$

Or (par la relation (6), cf. infra) :

$$\partial_t \langle u_t, \psi(t,.)\rangle = \langle u_t^{(1)}, \psi(t,.)\rangle + \langle u_t, \partial_t\psi(t,.)\rangle$$

Ergo :

$$0 = \int_{\mathbb{R}} \partial_t\langle u_t, \psi(t,.)\rangle dt + \int_{\mathbb{R}} \langle u_t^{(1)}, \psi(t,.)\rangle - i\langle u_t, \Delta\psi(t,.)\rangle dt$$

De la même façon que précédemment on montre que, comme $\psi(t,\xi) \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$:

$$\int_{\mathbb{R}} \partial_t\langle u_t, \psi(t,.)\rangle dt = 0$$

Et donc on a :

$$\int_{\mathbb{R}} \langle u_t^{(1)}, \psi(t,.)\rangle - i\langle u_t, \Delta\psi(t,.)\rangle dt = 0 \tag{3}$$

De plus, on vérifie que $\mathcal{F}(u_t^{(1)}) = \mathcal{F}(u_t)^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n),\ \forall t\in\mathbb{R},\ \langle \mathcal{F}(u_t^{(1)}), \varphi\rangle &= \langle u_t^{(1)}, \widehat{\varphi}\rangle \\ &= dr_t\langle u_t, \widehat{\varphi}\rangle + \langle u_t, \underbrace{\partial_t\widehat{\varphi}}_{=0 \text{ (indépendance en } t)}\rangle \\ &= \partial_t\langle \widehat{u_t}, \varphi\rangle \\ &= \langle \widehat{u_t}^{(1)}, \varphi\rangle + 0 \text{ par (6)} \end{aligned}$$

Ainsi, d'après (3) on a (en utilisant l'identité $\langle T, \varphi\rangle = \langle \mathcal{F}T, \overline{\mathcal{F}}\varphi\rangle$) :

$$\int_{\mathbb{R}} \langle \widehat{u_t}^{(1)}, \overline{\mathcal{F}}\psi(t,.)\rangle + i\langle \widehat{u_t}, \|.\|^2\overline{\mathcal{F}}\psi(t,.)\rangle dt = 0 \tag{4}$$

Soient $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ et $\chi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$; la relation (4) s'applique alors à $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$ telle que $\overline{\mathcal{F}}\psi(t,\xi) = e^{it\|\xi\|^2}\varphi(\xi)\chi(t)$, ce qui nous donne :

$$\forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n),\ \forall \chi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}), \quad \int_{\mathbb{R}} \langle(\widehat{u_t}^{(1)}, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle + i\langle \widehat{u_t}, \|.\|^2 e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle)\chi(t)dt = 0 \tag{5}$$

Or :

$$\partial_t\langle \widehat{u}_t, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle = \widehat{u}_t^{(1)}, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle + i\langle \widehat{u}_t, \|.\|^2 e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle$$

Ainsi la distribution $t \mapsto \partial_t\langle \widehat{u}_t, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle$ est nulle dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ donc $t \mapsto \partial_t\langle \widehat{u}_t, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle$ est nulle presque partout sur $\mathbb{R}$ (et donc nulle partout car de classe $\mathcal{C}^\infty$). Ainsi on a :

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \langle \widehat{u}_t, e^{it\|\cdot\|^2}\varphi\rangle = \langle \widehat{u_0}, \varphi\rangle = 0$$

Pour finir, fixons $t_0 \in \mathbb{R}$ et $\theta \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, avant de poser $\varphi : \xi \mapsto e^{-it_0\|\xi\|^2}\theta(\xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. On a alors $\langle \widehat{u_{t_0}}, e^{it_0\|\cdot\|^2}\varphi\rangle = 0$ i.e $\langle \widehat{u_{t_0}}, \theta\rangle = 0$ donc $\widehat{u_{t_0}} = 0$ donc $u_{t_0} = 0$. In fine on a bien $u = 0$.

Détails supplémentaires :

- L'espace $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$ s'injecte dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ via la formule :

$$\langle u, \psi\rangle := \int_{\mathbb{R}} \langle u_t, \psi(t,.)\rangle dt$$

- *Transformée de Fourier de l'opérateur* $\partial_t + i\Delta$. Un théorème de dérivation sous le signe intégral nous montre que ∂_t et $\overline{\mathcal{F}}$ commutent. En ce qui concerne le laplacien, le résultat découle du fait que $\overline{\mathcal{F}}(\partial_{x_i}\psi) = -i\xi_i\overline{\mathcal{F}}\psi$.
- On trouve le lemme suivant dans [Zui02], p.61 :

  Lemme 1
  Soit $T \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$.
  Alors pour tout $t \in \mathbb{R}$ *il existe* $T^{(1)} \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n))$ *tel que :*

  $$\forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n),\ \forall t_0 \in \mathbb{R}, \quad \partial_t(\langle T_t, , \varphi\rangle)(t_0) = \langle T_{t_0}^{(1)}, \varphi\rangle$$

  Si de plus $\psi \in \mathcal{S}^(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ *on a la relation suivante :*

  $$\partial_t\langle T_t, \psi(t,.)\rangle = \langle T_t^{(1)}, \psi(t,.)\rangle + \langle T_t, \partial_t\psi(t,.)\rangle \tag{6}$$

Références

[Zui02] Claude Zuily. *Éléments de distribution et d'équations aux dérivées partielles.* Dunod, 2002.