Equation de Schrödinger

Leçons concernées

- **222 :** Exemples d'équations aux dérivées partielles linéaires.
- **228 :** Continuité, dérivabilité, dérivation faible des fonctions réelles d'une variable réelle. Exemples et applications.
- **250 :** Transformation de Fourier. Applications.

Nous allons résoudre, sous certaines hypothèses, l'EDP : $\frac{\partial u}{\partial t} = i\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ appelée équation de Schrödinger, qui apparaît notamment en physique quantique.

Théorème. *Soit $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ un élément de l'espace de Schwartz sur $\mathbb{R}$. Il existe alors une unique solution $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ de l'équation de Schrödinger vérifiant $\forall x \in \mathbb{R}, u(x,0) = f(x)$ et telle que $x \longmapsto u(x,t)$ appartient uniformément à l'espace de Schwartz par rapport à t, c'est-à-dire :*

$$\forall T > 0, \forall k, l \geq 0, M_{k,l}^T := \sup_{t\in[-T;T]} \sup_{x\in\mathbb{R}} \left| x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x,t) \right| < +\infty$$

Et on a alors l'égalité : $u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} \hat{f}(\xi) e^{-i\xi^2 t} e^{i\xi x} d\xi$.

Démonstration. Nous allons démontrer cette proposition par analyse-synthèse.

Analyse : Puisque $x \longmapsto u(x,t)$ appartient uniformément à l'espace de Schwartz par rapport à t, on peut considérer la transformée de Fourier par rapport à x :

$$\hat{u}(\xi,t) = \int_{\mathbb{R}} u(x,t) e^{-ix\xi} dx$$

On souhaiterait dériver par rapport à t pour pouvoir utiliser le fait que u soit solution de l'équation de Schrödinger. Pour cela, on va appliquer un théorème de dérivation sous l'intégrale. Après avoir remarqué que l'intégrande est intégrable pour tout t (puisque qu'on travaille avec une fonction dans l'espace de Schwartz), on prends $T > 0$ et $t \in [-T;T]$. L'intégrande est dérivable par rapport à t et :

$$\left| \frac{\partial}{\partial t} u(x,t) e^{-ix\xi} \right| = \left| \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \right| = \frac{1}{1+x^2} \left(\left| \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \right| + x^2 \left| \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \right| \right) \leq \frac{M_{0,1}^T + M_{2,1}^T}{1+x^2}$$

et la fonction de droite définie alors une fonction intégrable. Le théorème de dérivation sous l'intégrale donne alors que, pour tout $\xi \in \mathbb{R}, t \longmapsto \hat{u}(\xi,t)$ est C^1 et :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t}(\xi,t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) e^{-ix\xi} dx = i \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) e^{-ix\xi} dx$$

car u est solution de l'équation de Schrödinger. Par deux intégrations par parties, et en utilisant le fait que pour tout t, $x \longmapsto u(x,t)$ est dans l'espace de Schwartz, on obtient alors :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t}(\xi, t) = -i\xi^2 \hat{u}(\xi, t)$$

On peut bien évidemment résoudre cette équation différentielle pour avoir que, pour tout $\xi \in \mathbb{R}$, il existe une constante $A(\xi)$ telle que $\forall t \in \mathbb{R}, \hat{u}(\xi, t) = A(\xi)e^{-i\xi^2 t}$. On trouve la constante en regardant ce qui se passe en $t = 0$: $\hat{u}(\xi, 0) = \int_{\mathbb{R}} u(x, 0)e^{-i\xi x}dx = \int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-i\xi x}dx = \hat{f}(\xi)$.

Au final, $\hat{u}(\xi, t) = \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t}$. Puisque f est dans l'espace de Schwartz, il en est de même pour cette dernière fonction, et on peut alors appliquer le transformée de Fourier inverse pour trouver :

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t}e^{i\xi x}d\xi$$

Ceci prouve l'unicité de la solution, et l'expression de l'hypothétique solution.

Synthèse : Posons u la fonction précédente, qui est bien définie puisque f, et donc $\hat{f}$, est dans l'espace de Schwartz. Une application directe du théorème de dérivation sous l'intégrale nous permet de voir que u est C^∞ (ce qui montre un effet régularisant de l'équation de Schrödinger), et un calcul direct nous permet de voir que u vérifie bien l'équation de Schrödinger. De plus, par formule d'inversion de Fourier, $u(x, 0) = f(x)$.

La seule hypothèse à vérifier est l'appartenance uniforme par rapport à t de $x \longmapsto u(x, t)$ à l'espace de Schwartz. On va pour cela utiliser une technique similaire à celle pour montrer la stabilité de l'espace de Schwartz par la transformée de Fourier.

Donnons-nous $T > 0$, et $k, l \geq 0$. Soit $t \in [-T; T]$. On a :

$$x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} i^l \xi^l x^k \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t}e^{i\xi x}d\xi$$

$$\left| x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x, t) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} \xi^l x^k \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t}e^{i\xi x}d\xi \right|$$

On remarque alors que $\frac{\partial^k}{\partial \xi^k}(e^{i\xi x}) = i^k x^k e^{i\xi x}$ soit $\left| x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x, t) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} \xi^l \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t} \frac{\partial^k}{\partial \xi^k}(e^{i\xi x})d\xi \right|$.

Dans cette dernière intégrale, on fait k intégrations par parties, en remarquant que, puisque $\hat{f}$ est dans l'espace de Schwartz, il ne reste à chaque fois que l'intégrale, avec un signe. Puisqu'on regarde en valeur absolue, on trouve alors :

$$\begin{aligned}
\left| x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x, t) \right| &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial^k}{\partial \xi^k}(\xi^l \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t})e^{i\xi x}d\xi \right| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\partial^k}{\partial \xi^k}(\xi^l \hat{f}(\xi)e^{-i\xi^2 t}) \right| d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \sum_{k'=0}^{k} \binom{k}{k'} \left| \frac{\partial^{k-k'}}{\partial \xi^{k-k'}}(\xi^l \hat{f}(\xi)) \frac{\partial^{k'}}{\partial \xi^{k'}}(e^{-i\xi^2 t}) \right| d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \sum_{k'=0}^{k} \binom{k}{k'} \left| \frac{\partial^{k-k'}}{\partial \xi^{k-k'}}(\xi^l \hat{f}(\xi))P_{k'}(\xi, t) \right| d\xi
\end{aligned}$$

où $P_{k'}(X,Y)$ est un certain polynôme de deux variables (qu'on pourrait calculer explicitement, mais on souhaite juste son existence ici). Au final, en utilisant le fait que $|t| \leq T$:

$$\left| x^k \frac{\partial^l u}{\partial x^l}(x,t) \right| \leq \frac{1}{2\pi} \sum_{k'=0}^{k} \binom{k}{k'} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\partial^{k-k'}}{\partial \xi^{k-k'}}(\xi^l \hat{f}(\xi)) \right| |P_{k'}(|\xi|,T)| d\xi < +\infty$$

et cette dernière quantité est bien finie car $\xi \longmapsto \xi^l \hat{f}(\xi)$ est dans l'espace de Schwartz, et que l'espace de Schwartz est stable par dérivation et par multiplication par un polynôme. En particulier, l'intégrande est intégrable, et nous avons une somme finie de quantités finies.

Ainsi, la quantité que nous avons appelé $M_{k,l}^T$ existe et est bien finie, ce qui achève ce développement.

$\square$

Remarques :

— Développement assez lourd en notations, privilégiez les explications à l'oral pour éviter de perdre du temps. En particulier, si on veut rentrer dans les 15 minutes, il ne faut surtout pas s'embêter à calculer le polynôme $P_{k'}$; il existe, ça nous suffit.

— L'hypothèse d'appartenance uniforme à l'espace de Schwartz peut sembler très forte, mais elle est absolument essentielle de la preuve ; c'est grâce à cette hypothèse qu'on peut dériver sous l'intégrale. Dans le cas où nous n'avons pas cette hypothèse, il faut interpréter tous ces calculs au sens des distributions. L'avantage ici, dans ce développement, c'est que nous avons une solution forte, là où sans l'hypothèse d'appartenance à l'espace de Schwartz, ce serait une solution faible.