Indiquons encore une chose en ce qui concerne la normalisation. Si vous observez l'expression de l'Hamiltonien des équations de Schrödinger vues jusqu'à présent, alors si λ est une constante réelle ou complexe nous avons toujours:

$$H\left(\lambda\Psi\right)=\lambda H\left(\Psi\right)$$

Si nous posons que Ψ est une solution de l'équation de Schrödinger, nous voyons alors que $\lambda\Psi$ est aussi solution de l'équation. En effet, nous obtenons:

$$H\left(\lambda\Psi\right)=\lambda H\left(\Psi\right)=\lambda E\Psi=E\left(\lambda\Psi\right)$$

En prenant en compte le fait que la fonction $\lambda\Psi$ est normalisée, nous obtenons alors:

$$\int\left|\lambda\Psi\right|^2 dx=1\Rightarrow\left|\lambda\right|^2\int\left|\Psi\right|^2 dx=1\Rightarrow\left|\lambda\right|^2=1$$

d'où:

$$\lambda=\pm 1 \text{ ou } \lambda=\pm i$$

nous avons donc quatre solutions qui correspondent à la fonction de départ. Ces solutions sont normalisées et correspondent à la même valeur d'énergie E_i ainsi qu'à la même densité de probabilité. Ceci montre qu'il n'est pas utile de cherche la signification d'une valeur négative ou complexe de Ψ, car $\left|\Psi\right|^2$ est réel et n'est pas négatif. Seul le carré d'une fonction d'onde, qui correspond à la densité de probabilité, est significatif d'un point de vue physique.

Il faut remarquer avant que nous passions à un autre sujet quelque chose de très important!

Effectivement, toute équation de la forme:

$$\Psi(x)e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$$

et donc solution de l'équation évolutive de Schrödinger et comme dans les systèmes quantiques l'hamiltonien peut prendre (ou être associé à) plusieurs valeurs propres discrètes notées traditionnellement E_n nous avons alors, comme mentionné au début de ce chapitre, par le principe de superposition linéaire des équations différentielles la solution générale suivante:

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{+\infty}\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$$

dont nous aurons plusieurs exemples pratiques (de la discrétisation des états d'énergie et que ceux-ci sont en nombre infini) dans le présent chapitre et celui de Chimie Quantique.

Si nous sortons la constante de $\Psi_n(x)$ dans la relation précédente, nous avons alors:

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{+\infty}A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$$

Cette dernière relation s'écrit alors sous la forme ket-bra traditionnelle suivante:

$$|\Psi\rangle=\sum_{n=1}^{+\infty}A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}=\sum_{n=1}^{+\infty}c_n|\psi_n\rangle$$

où le coefficient constant c_n est assimilé à A_n .

Nous disons alors que l'état $|\Psi\rangle$ est une superposition d'états élémentaires. $|\Psi\rangle$ représente donc aussi une particule d'onde comme étant simultanément en plusieurs sous-états différents.

Il est intéressant de remarquer que chaque solution:

$$A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$$

décrit un "état stationnaire". En effet, nous avons:

$$\left|A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2=\left|A_n\Psi_n(x)\right|^2\left|e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2=\left|A_n\Psi_n(x)\right|^2$$

qui est donc indépendant du temps d'où l'origine du nom "état stationnaire" (nous avions promis d'en définir l'origine en début de chapitre… donc voilà qui est fait!).

Les fonctions $\Psi_n(x)$ doivent être normalisées pour que la fonction d'onde totale soit normalisée. Nous devons donc avoir:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2=\left|\frac{\sum\limits_n A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}}{\sqrt{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\sum\limits_n A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2dx}}\right|^2=\frac{\left|\sum\limits_n A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\sum\limits_n A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2dx}$$

$$=\frac{\sum\limits_i\left|A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\sum\limits_n\left|A_n\Psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\right|^2dx}=\frac{\sum\limits_n\left|A_n\Psi_n(x)\right|^2}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\sum\limits_n\left|A_n\Psi_n(x)\right|^2dx}=\frac{\sum\limits_n\left|A_n\right|^2\left|\Psi_n(x)\right|^2}{\sum\limits_n\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|A_n\right|^2\left|\Psi_n(x)\right|^2dx}$$

$$=\frac{\sum\limits_n\left|A_n\right|^2\left|\Psi_n(x)\right|^2}{\sum\limits_n\left|A_n\right|^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi_n(x)\right|^2dx}$$

où nous avons donc utilisé les propriétés suivantes du module au numérateur et dénominateur:

$$\left|\sum_n z_n\right|^2=\left(\sum_n\left|z_n\right|\right)^2\text{ et }\left|z_1z_2\right|^2=\left|z_1\right|^2\left|z_2\right|^2$$

Soit avec la notation bra-ket:

$$\left\|\Psi\right\rangle\right|^2=\frac{\sum\limits_n\left|A_n\right|^2\left|\Psi_n(x)\right|^2}{\sum\limits_n\left|A_n\right|^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi_n(x)\right|^2dx}=\frac{\sum\limits_n\left|c_n\right|^2\left\|\Psi_n\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_n\left|c_n\right|^2\left\langle\Psi_n\middle|\Psi_n\right\rangle}$$

Donc chaque état