

## Liste d'exercices VII

En lien avec la semaine du 7 novembre 2022

1. On considère un électron d'une molécule triatomique linéaire formée de trois atomes équidistants. On dénote par  $\psi_a$ ,  $\psi_b$  et  $\psi_c$  les trois états orthonormaux de l'électron correspondant aux états localisés près des noyaux  $A$ ,  $B$  et  $C$  respectivement :



L'espace des états de cet électron est alors l'espace engendré par les états  $\psi_a$ ,  $\psi_b$  et  $\psi_c$ . Le hamiltonien de l'électron est donné par l'opérateur linéaire défini par

$$H\psi_a = E_0\psi_a - w\psi_b, \quad H\psi_b = E_0\psi_b - w\psi_a - w\psi_c, \quad H\psi_c = E_0\psi_c - w\psi_b,$$

où  $E_0$  et  $w$  sont des quantités positives.

- (a) Calculer les valeurs propres et les états propres de  $H$ .
- (b) Si au temps  $t = 0$ , l'électron est dans l'état  $\psi_a$ , déterminer son état pour les autres temps en résolvant l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t).$$

- (c) Discuter qualitativement la localisation de l'électron aux instants ultérieurs. Y a-t-il des moments où l'électron est parfaitement localisé autour d'un des atomes ?