

On considère une molécule constituée de 3 atomes identiques et alignés. Les fonctions d'onde ou états d'un des électrons périphérique de la molécule sont désignées par Ψ_A , Ψ_B et Ψ_C selon qu'il est localisé sur l'atome A, B et C. Elles sont toutes solutions propres de l'équation de Schrödinger pour les potentiels V_A , V_B et V_C créés A, B ou C avec la même énergie E_0 .

L'électron peut sauter d'un atome à l'autre et la fonction d'onde Ψ de la molécule mélange les 3 états Ψ_A , Ψ_B et Ψ_C . Le couplage entre ces états est décrit par un potentiel W défini par

$$W\Psi_A = -k\Psi_B \quad W\Psi_C = -k\Psi_B \quad \text{et} \quad W\Psi_B = -k\Psi_A - k\Psi_C \quad (k \text{ est une constante positive})$$

- 1) Chercher les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger pour le potentiel $V_i + W$ sous la forme d'une superposition de Ψ_A , Ψ_B et Ψ_C qui forme une base orthogonale de l'espace des fonctions d'ondes. Précisez les niveaux d'énergie associés \square

- 2) A $t = 0$, l'électron est localisé sur l'atome A. Exprimez sa fonction d'onde pour les temps ultérieurs. A quels instants l'électron sera parfaitement localisé en A, B ou C ?