Université Djilali Bounaama
Faculté des sciences et technologie
Département des sciences de la matière

2ème année licence en chimie fondamentale
module : chimie quantique 1

# Série 1

## Exercice1 :

Dans la suite, $\{|e_n>\}$ tel que $n\epsilon N^*$, désigne une base orthonormée complète engendrant un espace vectoriel$\in$.

a-Soit $|\psi>$un vecteur quelconque de $\in$ développé suivant : $|\psi>=\sum_n C_n\,|e_n>$

-Exprimer chaque composante $C_n$ sous la forme d'un produit scalaire et en déduire une décomposition de l'opérateur identité 1.

b-Soit $P_n$ les opérateurs définis comme : $P_n=|e_n><e_n|$

-Examiner l'action d'un $P_n$ quelconque sur $|\psi>$.

c-Montrer que les opérateurs $\{P_n\}$ satisfont les relations suivantes : $(P_n)^2= P_n$ et $P_n P_m= \delta_{nm} P_n$.

## Exercice2 :

On considère un système physique décrit à t=0 par le vecteur :

$$|\Psi_0>=\frac{1}{\sqrt{2}}|u_1>+\frac{1}{2}|u_2>+\frac{1}{\sqrt{8}}|u_3>+\frac{1}{\sqrt{8}}|u_4>$$

$\{|u_i>\}$ Étant une base orthonormée. Dans cette base, l'opérateur Hamiltonien du système s'écrit :

$H|u_1>=\hbar w|u_1>$ ; $H|u_2>=0$ ; $H|u_3>=-\hbar w|u_3>$; $H|u_4>=3\hbar w|u_4>$ w : la pulsation.

1-Calculer la norme de$|\Psi_0>$.

2-On mesure à t=0, l'énergie du système. Quelles valeurs obtient-on et avec quelles probabilités ?

3-Lors de la mesure, à t=0, quelle est la probabilité de trouver le système dans l'état$|u_3>$?.

4-Calculer la valeur moyenne de H dans l'état$|\Psi_0>$.

5- On fait évoluer le système dans le temps, Donner l'expression de l'état$|\Psi_t>$.

## Exercice3 :

On considère un système quantique dont le vecteur d'état à l'instant t s'écrit

$$|\Psi(t)> = \sum c_n(t)|u_n>$$

Ou les $|u_n>$ une base orthonormée complète et discrète de l'espace des états $\in$.

1-Déterminer la relation que doivent vérifier les coefficients $c_n(t)$pour que $|\Psi(t)>$ soit orthonormée à l'unité.

2-On définit l'opérateur densité par : $\rho(t)=|\Psi(t)><\Psi(t)|$.

a-Montrer que : $\rho(t)$ est hermétique et que $\rho^2(t)=\rho(t)$.

b-Calculer les éléments de matrice de ρ(t) dans la base $\{|u_n>\}$ et montrer que la trace tr $\rho(t)=1$.

## Exercice4 :

On considère un système quantique dont l'hamiltonien H ne dépend pas du temps. Dans la description de Schrödinger, l'état quantique$|\Psi(t)>$, à l'instant t est déterminé à partir de l'état quantique $|\Psi(t_0)>$par l'action d'un opérateur linéaire ou opérateur d'évolution $U(t,t_0)$

$$|\Psi(t)> = U(t,t_0)|\Psi(t_0)> \quad \text{avec } U(t_0,t_0)=1 \quad \forall\, t_0$$

a-Montrer que : $U(t,t_0)$ satisfait l'équation différentielle :

$$i\hbar\frac{du(t,t_0)}{dt} = H\,U(t,t_0) \qquad \forall|\Psi(t_0)>$$

b- En déduire l'expression de $U(t,t_0)$ en fonction de H.

c- Montrer que l'hermicité de H impose à $U(t,t_0)$ d'être unitaire.