Mécanique quantique II – Série 4

à rendre le 23 octobre 2012 – assistant : Julien Guillod (SCI 212)
exercices à présenter : 1 & 2

1 Couplage spin-orbite

L'espace de Hilbert pour le couplage du moment cinétique orbital et du spin d'une particule de spin $s = 1/2$ est donné par $\mathscr{H} = L_2(S_2, \mathbb{C}) \otimes \mathbb{C}^2$, *i.e.* est engendré par

$$\left\{ |l, m_l; s, m_s\rangle = |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \,,\, l \in \mathbb{N},\; m_l \in \{-l, \dots, l\}\,,\, s = \tfrac{1}{2},\; m = \pm s \right\} ,$$

avec, en supposant que $\hbar = 1$,

$$\mathbf{L}^2|l, m_l\rangle = l(l+1)|l, m_l\rangle \,, \qquad L_z|l, m_l\rangle = m_l|l, m_l\rangle \,,$$
$$\mathbf{S}^2|s, m_s\rangle = s(s+1)|s, m_s\rangle \,, \qquad S_z|s, m_s\rangle = m_s|s, m_s\rangle \,.$$

Le moment cinétique total est $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

1. Démontrer que les produits $|l, m_l; s, m_s\rangle$ sont des états propres de J_z et calculer les valeurs propres.
2. Trouver une base dans laquelle les opérateurs $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2$, $\mathbf{J}^2$ et J_z sont diagonaux.
3. Déterminer les états propres et valeurs propres de $W = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$.

2 Principe variationnel appliqué à l'atome d'hélium

Le but est d'estimer l'énergie de l'état fondamental d'un atome d'hélium en utilisant un principe variationnel. Dans l'approximation du noyau infiniment lourd, l'Hamiltonien H des deux électrons s'écrit

$$H = H_Z^1 + H_Z^2 + W, \qquad H_Z^i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i|} \,, \qquad W = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \,,$$

avec $Z = 2$ puisqu'il y a deux protons dans le noyau de l'hélium.

L'état fondamental de H_Z^i, c'est-à-dire d'un électron dans le potentiel électrostatique créé par un noyau composé de Z charges est donné par

$$\Psi_Z^i(\mathbf{r}_i) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \exp(-Z|\mathbf{r}_i|/a_0) \,, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \,.$$

En négligeant le terme d'interaction W dans H l'état fondamental est donné par $\Psi_Z(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_Z^1(\mathbf{r}_1)\Psi_Z^2(\mathbf{r}_2)$ avec $Z = 2$. Il n'existe pas à ce jour de solution analytique de ce problème si l'on tient compte de l'interaction ; le but est de déterminer une approximation de l'énergie fondamentale en utilisant un principe variationnel. L'idée du principe variationnel est de considérer la fonction propre de l'état fondamental de l'Hamiltonien sans interaction, de calculer la valeur moyenne de l'énergie de l'Hamiltonien complet dans cet état et enfin d'en faire une minimisation par rapport à une grandeur que l'on considère comme une variable.

Dans le cas présent, on propose la formulation variationnelle suivante en fonction de Z,

$$\Psi_Z(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\Psi_Z^1(\mathbf{r}_1)\Psi_Z^2(\mathbf{r}_2)=\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\exp(-Z|\mathbf{r}_1|/a_0)\exp(-Z|\mathbf{r}_2|/a_0)\,,$$

qui correspond au fait que physiquement on peut imaginer que le champ électrostatique ressenti par un électron, c'est-à-dire celui créé par le noyau et l'autre électron, revient à celui d'un noyau avec un nombre de charge $Z\neq 2$. On dit que le potentiel électrostatique créé par le noyau est écranté par l'autre électron.

1. Expliquer pourquoi, la fonction d'onde $\Psi_Z(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ est symétrique, alors que les électrons sont des fermions.
2. Calculer $\langle\Psi_Z|H_2^i|\Psi_Z\rangle$.
3. (facultatif) Démontrer que $\langle\Psi_Z|W|\Psi_Z\rangle=\frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_0}$.
   Indication : utiliser des coordonnées bien choisies, inspirées par celles utilisées pour le développement multipolaire.
4. Déterminer l'énergie totale $E(Z)=\langle\Psi_Z|H|\Psi_Z\rangle$.
5. Minimiser l'énergie totale $E(Z)$ en fonction de Z, déterminer le Z optimal et l'énergie minimale correspondante. Comparer ce résultat à la valeur expérimentale $-78.8\,\mathrm{eV}$ et au résultat si on avait supposé aucun écrantage, c'est-à-dire $Z=2$.

3 Système à trois spins

L'espace de Hilbert de trois particules de spin 1/2 dont on ignore les variables orbitales est $\mathscr{H}=\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ et soit $\mathbf{J}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3$ le moment cinétique total des trois particules. En posant $\hbar=1$, une base de $\mathscr{H}$ est donnée par les vecteurs propres de S_{1z}, S_{2z} et S_{3z}, c'est-à-dire par $\{|\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3\rangle,\ \varepsilon_i=\pm\}$ avec

$$S_{iz}|\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3\rangle=\frac{\varepsilon_i}{2}|\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3\rangle\,.$$

Déterminer, en fonction de cette base, une base orthonormée de vecteurs propres communs à $\mathbf{J}^2$ et J_z. Ces deux opérateurs forment-ils un ensemble complet d'observables qui commutent ?

Indication : commencer par composer deux spins, puis ajouter le troisième ou travailler directement avec les opérateurs $J_\pm$.