TD#3 : États singulet et triplet

Rq : Les questions marquées d'une * (ex **2*/**) sont à faire en préparation de la séance de TD.

La projection du spin d'un électron selon une direction quelconque, en particulier selon z, donne lieu à deux valeurs propres $\pm\hbar/2$. Chacune de ces valeurs propres est associée respectivement aux deux états propres :

$$|+\rangle := |s = 1/2, m_s = +1/2\rangle \quad \text{et} \quad |-\rangle := |s = 1/2, m_s = -1/2\rangle \tag{1}$$

Dans ce TD, on se propose d'étudier le spin total de deux électrons. L'espace de Hilbert naturel dans lequel on décrit ce système est l'espace produit tensoriel de chacun. Le spin total s'écrit donc :

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 \otimes \hat{\mathbb{I}} + \hat{\mathbb{I}} \otimes \hat{\vec{S}}_2 \tag{2}$$

où $\hat{\vec{S}}_i = (\hat{S}_{ix}, \hat{S}_{iy}, \hat{S}_{iz})$ est le spin d'un électron $i \in \{1, 2\}$, et $\hat{\mathbb{I}}$ est la matrice identité. Par abus de notation, on note simplement : $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$, et en particulier : $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$.

A. Composition de deux spins 1/2

1*/ Rappeler les valeurs et vecteurs propres de $\hat{\vec{S}}_i^2$.

2*/ Quelle est la dimension de l'espace produit tensoriel ? Quelle est sa base canonique que l'on la notera $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$?

3*/ Justifier le fait que $\hat{\vec{S}}^2$ et $\hat{S}_z$ admettent une base commune d'états propres, que l'on notera $\{|S, M\rangle\}$, telle que :

$$\hat{\vec{S}}^2 |S, M\rangle = \hbar^2 \, S(S + 1) \, |S, M\rangle \tag{3}$$

$$\hat{S}_z |S, M\rangle = \hbar \, M \, |S, M\rangle \tag{4}$$

4*/ Quelles valeurs peuvent prendre S et M ?

Les théorèmes d'addition de moments cinétiques prouvent l'existence de la base $\{|S, M\rangle\}$ et imposent les valeurs prises par S et M. Par contre, ils ne fournissent pas de lien direct entre les deux bases $\{|S, M\rangle\}$ et $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$. Dans la suite du TD, on cherche à établir ce lien.

5/ Écrire la matrice de $\hat{S}_z$ dans la base $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$.

6/ Diagonalisation de $\hat{\vec{S}}^2$:

— Montrer que $\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \dfrac{1}{2}(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}) + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$ où $\hat{S}_{i\pm} = \hat{S}_{ix} \pm \hat{S}_{iy}$.

— Écrire la matrice de $\hat{\vec{S}}^2$ dans la base $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$. On rappelle l'action des opérateurs $\hat{S}_{i\pm}$ sur les états $|\pm\rangle$:

$$\hat{S}_{i+}\,|+\rangle = 0 \qquad\qquad \hat{S}_{i+}\,|-\rangle = \hbar\,|+\rangle \tag{5}$$

$$\hat{S}_{i-}\,|+\rangle = \hbar\,|-\rangle \qquad\qquad \hat{S}_{i-}\,|-\rangle = 0 \tag{6}$$

— Diagonaliser $\hat{\vec{S}}^2$ et déterminer ses états propres.

7/ Diagonalisation simultanée de $\hat{\vec{S}}^2$ et de $\hat{S}_z$:

— Écrire la matrice de $\hat{S}_z$ dans la base propre de $\hat{\vec{S}}^2$.

— Connaissant les valeurs possibles que peut prendre S et M, identifier cette base à la base $\{|S, M\rangle\}$.

8/ Connaissez-vous une autre méthode pour faire la correspondance entre les états des bases $\{|S, M\rangle\}$ et $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$?

Définition : On appelle état **singulet** l'état $|S = 0, M = 0\rangle$ et l'état **triplet** la famille d'états $|S = 1, M = -1, 0, +1\rangle$. Ces états sont utiles pour étudier plusieurs situations physiques notamment la description de deux électrons identiques et indiscernables.

B. États fondamental et excité de l'Hélium

L'atome d'Hélium He peut être modélisé par un puits quantique suffisamment profond pour contenir (au moins) deux états liés : **1s** et **2s**. He contient deux électrons **identiques et indiscernables**. En première approximation, l'hamiltonien total du système s'écrit :

$$\hat{H}_{\mathsf{He}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{\mathsf{Coulomb}} \tag{7}$$

où :

— $\hat{H}_i = \dfrac{\hat{p}_i^2}{2\,m_e} - \dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}_i}$ est le potentiel central vu par l'électron $i \in \{1, 2\}$, $\hat{p}_i$ et $\hat{r}_i$ étant respectivement les opérateurs d'impulsion et de position,

— $\hat{H}_{\mathsf{Coulomb}} = \dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}_{12}}$ est l'hamiltonien d'interaction électrostatique entre les 2 électrons, $\hat{r}_{12} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2$ étant la distance relative entre les deux.

9/ Justifier qu'un état quelconque du système peut se mettre sous la forme suivante :

$$|\psi_{\mathsf{tot}}\rangle = |\psi_{\mathsf{orb}}\rangle \otimes |\psi_{\mathsf{spin}}\rangle \tag{8}$$

L'indiscernabilité des deux particules implique que l'état $|\psi_{\mathsf{tot}}\rangle$ doit être invariant sous l'effet d'une permutation $\hat{P}_{12}$. Ainsi, l'état permuté et l'état initial ne doivent différer que d'une phase globale : $\hat{P}_{12}\,|\psi_{\mathsf{tot}}\rangle = e^{i\theta}\,|\psi_{\mathsf{tot}}\rangle$. En permutant deux fois, on retrouve sur l'état initial : $\hat{P}_{12}^2 = \hat{\mathbb{I}}$, ce qui implique que $e^{i2\theta} = 1$ ou encore $e^{i\theta} = \pm 1$. On a donc deux cas possibles :

— les *bosons* pour lesquels le vecteur d'état de deux particules identiques est toujours *symétrique* par l'opération $\hat{P}_{12}$.

— les *fermions* pour lesquels le vecteur d'état de deux particules identiques est toujours *anti-symétrique* par l'opération $\hat{P}_{12}$.

10/ Peut-on décrire l'état de spin des deux électrons par l'état $|+-\rangle$? Dans quelle base est-il le plus commode de décrire $|\psi_{\text{spin}}\rangle$?

11/ Le vecteur d'état $|\psi_{\text{tot}}\rangle$ étant anti-symétrique, que cela implique-t-il sur $|\psi_{\text{orb}}\rangle$ et $|\psi_{\text{spin}}\rangle$?

12/ Quelle est la parité de chaque état de la base $\{|S, M\rangle\}$?

13/ État fondamental : On suppose que les deux électrons sont dans l'état orbital de plus basse énergie $|1s, 1s\rangle$. Quel est l'état de spin dans ce cas ?

14/ État excité : On suppose que les deux électrons sont dans l'état de spin $|S = 1, M = 1\rangle$. Quel est l'état orbital dans ce cas ?

Conseils de lecture : Pour aller plus loin, notamment pour décrire les vecteurs d'état de N particules identiques, on peut se référer au chapitre **16 Particules identiques** du livre *Mécanique Quantique* de Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard.