Travaux Dirigés n°7

PARTICULES IDENTIQUES

1 Dénombrement d'états à plusieurs particules

Soit h_0 le Hamiltonien d'une particule ; on suppose que l'opérateur h_0 n'agit que sur les variables orbitales, et possède trois niveaux équidistants d'énergies 0, $\hbar\omega_0$, $2\hbar\omega_0$ (où ω_0 est une constante réelle et positive), non-dégénérés dans l'espace des états orbitaux $\mathcal{E}_r$ (dans l'espace total orbitales plus spin, la dégénérescence de chacun de ces niveaux est égale à $2s+1$, s étant le spin de la particule). Du point de vue des variables orbitales, on s'intéresse uniquement au sous-espace de $\mathcal{E}_r$ engendré par les trois états propres correspondants de h_0.

1. On considère un système de trois électrons indépendants dont le Hamiltonien s'écrit

$$H = h_0(1) + h_0(2) + h_0(3)$$

   (a) Trouver les premiers niveaux d'énergies de H et leur degré de dégénérescence.
   (b) Donner l'expression des états quantiques physiques correspondant.
2. Même question pour un système de trois bosons identiques de spin 0.

2 Déterminants de Slater

On considère un système de deux électrons qui vont être placés dans deux spin-orbitales. On construira les déterminants de Slater représentant l'état du système et on cherchera à les écrire sous la forme d'un produit d'une fonction d'onde orbitale totale par une fonction d'onde de spin total. On identifiera ensuite les nombres quantiques S et M_S correspondant.

1. Les deux électrons sont dans le même état orbital ϕ_a, avec des parties de spin opposées α et β. Mettre le déterminant de Slater sous la forme du produit d'une fonction d'onde orbitale totale symétrique par une fonction d'onde de spin total antisymétrique.
2. Les deux électrons sont dans deux orbitales différentes ϕ_a et ϕ_b, avec un même état de spin α. Mettre le déterminant de Slater sous la forme du produit d'une fonction d'onde orbitale totale antisymétrique par une fonction d'onde de spin total symétrique.
3. Les deux électrons sont dans deux orbitales différentes ϕ_a et ϕ_b, avec des états de spin quelconques, α ou β. Ecrire tous les déterminants de Slater correspondant aux différentes configurations possibles. Factoriser les déterminants qui peuvent l'être. Montrer qu'il est possible de trouver des combinaisons linéaires des déterminants non factorisés qui sont, elles, factorisables. Identifier à chaque fois les valeurs de S et M_S.

CORRIGE

1 Dénombrement d'états à plusieurs particules

1.

$$H = h_0(1) + h_0(2) + h_0(3)$$

(a) $E = 0$ n'existe pas (trois électrons dans un même état c'est interdit par le principe d'exclusion de Pauli).
L'état de plus basse énergie (état fondamental) a donc l'énergie $E^{(f)} = \hbar\,\omega_0$, avec 2 électrons dans l'état d'énergie 0 et un avec l'énergie $\hbar\,\omega_0$. Son dégré de dégénérescence est $g = 2$ (spin + ou spin -).
Le premier état excité a l'énergie $E^* = 2\,\hbar\,\omega_0$ et sa dégénérescence est $g = 4$. Il y a un électron dans l'état d'énergie 0 et 2 électrons dans l'état d'énergie $\hbar\,\omega_0$ ou 2 électrons dans l'état d'énergie 0 et 1 électron dans l'état d'énergie $2\hbar\,\omega_0$.
Le deuxième état excité a l'énergie $E^{**} = 3\,\hbar\,\omega_0$ et sa dégénérescence est $g = 8$. Il y a un électron dans l'état d'énergie 0, 1 électron dans l'état d'énergie $\hbar\,\omega_0$ et 1 électron dans l'état d'énergie $2\,\hbar\,\omega_0$. Avec la possibilité de spin + et spin - pour chacun d'eux, il y a 8 possibilités.

(b) On écrira $|n : u_i\rangle \equiv |\phi_i(n)\rangle\,|s(n)\rangle$, où $n = 1,2,3$ indique l'électron, $\phi_i(n), i = 0,1,2$ les orbitales d'énergie 0, $\hbar\,\omega_0$ et $2\,\hbar\,\omega_0$, respectivement, et $s = \alpha,\beta$ les états de spin + et -, respectivement.
Niveau fondamental (2 états, $E^{(f)} = \hbar\,\omega_0$) :

$$|\psi_1^{(f)}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_2^{(f)}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

Premier niveau excité (4 états, $E^* = 2\hbar\,\omega_0$) :

$$|\psi_1^*\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_2^*\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_3^*\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_2(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_2(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_4^*\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_2(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_2(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

Deuxième niveau excité (8 états, $E^{**} = 2\hbar\,\omega_0$) :

$$|\psi_1^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_2^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_3^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_4^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_5^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_6^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_7^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle \end{vmatrix}$$

$$|\psi_8^{**}\rangle = (1/\sqrt{6}) \begin{vmatrix} |\phi_0(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_1(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_2(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_0(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_1(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \\ |\phi_0(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\alpha(3)\rangle & |\phi_1(3)\rangle\,|\beta(3)\rangle \end{vmatrix}$$

2. Niveau fondamental : $E^{(f)} = 0$

$$|\psi^{(f)}\rangle = |\phi_0(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle$$

état non dégénéré.
Premier niveau excité : $E^{*} = \hbar\,\omega_0$

$$|\psi^{*}\rangle = (3)^{-1/2}\left[|\phi_0(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle + |\phi_0(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle + |\phi_1(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle\right]$$

état non dégénéré.
Deuxième niveau excité : $E^{**} = 2\,\hbar\,\omega_0$, $g = 2$

$$|\psi_1^{**}\rangle = (3)^{-1/2}\left[|\phi_0(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle + |\phi_1(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle + |\phi_1(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle\right]$$

$$|\psi_2^{**}\rangle = (3)^{-1/2}\left[|\phi_0(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_2(3)\rangle + |\phi_0(1)\rangle\,|\phi_2(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle + |\phi_2(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle\right]$$

Troisième niveau excité : $E^{**} = 3\,\hbar\,\omega_0$, $g = 2$

$$|\psi_1^{***}\rangle = |\phi_1(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle$$

$$|\psi_2^{***}\rangle = (6)^{-1/2}\Big[|\phi_0(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_2(3)\rangle + |\phi_0(1)\rangle\,|\phi_2(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle + |\phi_1(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_2(3)\rangle$$
$$+|\phi_1(1)\rangle\,|\phi_2(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle + |\phi_2(1)\rangle\,|\phi_0(2)\rangle\,|\phi_1(3)\rangle + |\phi_2(1)\rangle\,|\phi_1(2)\rangle\,|\phi_0(3)\rangle\Big]$$

2 Déterminants de Slater

1.
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\phi_a(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_a(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_a(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_a(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \end{vmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_a(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\Big[|\alpha(1)\rangle\,|\beta(2)\rangle - |\beta(1)\rangle\,|\alpha(2)\rangle\Big] = |\phi_a(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\,|S=0,M=0\rangle$$

2.
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\phi_a(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_b(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_a(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_b(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \end{vmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\Big]|\alpha(1)\rangle\,|\alpha(2)\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\Big]|S=1,M=1\rangle$$

3. On a 2 états non factorisables :
$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\phi_a(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle & |\phi_b(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle \\ |\phi_a(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle & |\phi_b(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle \end{vmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle - |\phi_b(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle\Big]$$
$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\phi_a(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle & |\phi_b(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle \\ |\phi_a(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle & |\phi_b(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle \end{vmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\beta(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle\,|\alpha(2)\rangle - |\phi_b(1)\rangle\,|\alpha(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\,|\beta(2)\rangle\Big]$$
Si on combine ces deux états :
$$|\psi_1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\Big] = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle + |\phi_b(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\Big]|S=0,M=0\rangle$$
$$|\psi_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\Big] = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\phi_a(1)\rangle\,|\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1)\rangle\,|\phi_a(2)\rangle\Big]|S=1,M=0\rangle$$