Corrigé du TD #5

1. $H = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m} + V$

2. $H = \frac{(\vec{p}_1+\vec{p}_2)^2}{4m} + \frac{1}{m}\left(\frac{\vec{p}_1-\vec{p}_2}{2}\right)^2 + V(r)$

$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ conjugué de $\vec{R} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2$

$\vec{p} = \frac{\vec{p}_2 - \vec{p}_1}{2}$ " de $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$

$H = H_{cm} + H_r$ $\quad H_{cm} = \frac{\vec{P}^2}{4m}$ libre

$H_r = \frac{\vec{p}^2}{m} + V(r)$ intrinsèque ou relatif

3. $\vec{L}^2$ commute avec $\vec{p}^2$, r, $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ et $\vec{L}$, $\vec{J}^2$ et J_z

donc si $V_4 = 0$ $\quad [H, L^2] = 0$

on peut chercher un état propre simultané de L^2, J^2, S^2, J_z et H

4. On peut donc chercher des états $|(l,s)\,j\,j_z\rangle\, F(r)$ avec $F(r) = \frac{u_{lsj}(r)}{r}$

$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2) = \frac{\hbar^2}{4}$ si $S = 1$ et $-\frac{3\hbar^2}{4}$ si $S = 0$

$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{S}^2 - \vec{L}^2) = \frac{1}{2}\left[\,j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)\right]\hbar^2$

l'équation radiale sera

$$-\frac{\hbar^2}{m}\frac{l(l+1)}{r^2}u_{lsj}(r) - \frac{\hbar^2}{m}u''_{lsj}(r) + (V_1 + V_2\,\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2 + V_3\,\vec{L}\cdot\vec{S})\,u_{lsj}(r) = E\,u_{lsj}(r)$$

avec les expressions ci-dessus de $\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$ et $\vec{L}\cdot\vec{S}$

5. La parité est $P = (-1)^l$ on ne peut mélanger des états l pair et l impair si la parité est conservée

6. $S_{12} = 3\,\vec{\sigma}_1\cdot\hat{r}\;\vec{\sigma}_2\cdot\hat{r} - \vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$

$= \frac{3}{2}\left[(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2)\cdot\hat{r} - (\vec{\sigma}_1\cdot\hat{r})^2 - (\vec{\sigma}_2\cdot\hat{r})^2\right] - \frac{1}{2}\left[(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2)^2 - \vec{\sigma}_1^{\,2} - \vec{\sigma}_2^{\,2}\right]$

avec $\vec{\sigma}_1\cdot\hat{r} = 1\!\!1$ et $\vec{\sigma}_1^{\,2} = 3 \times 1\!\!1$

$S_{12} = \frac{1}{2}\left[3(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2)\cdot\hat{r} - (\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2)^2\right] = 2\left[3(\vec{S}\cdot\hat{r})^2 - \vec{S}^2\right]$

7 $[S_{12}, P] = 0$

$[S_{12}, \vec{L}^2] \neq 0$

Conséquence : Possibilité de mélange d'états de même j mais de l différents, mais avec la même parité de l

ex : $l=0\ S=1,\ J=1$ et $l=2,\ S=1,\ J=1$

8. oui $H(\vec{S}_1, \vec{S}_2) = H(\vec{S}_2, \vec{S}_1)$

Conclusion les états propres sont symétriques ou antisymétriques dans cet échange.

Pas de mélange $S=0$ (antisymétrique) et $S=1$ (symétrique) qui pourraient avoir par ailleurs même P et même $\vec{J}^2$

comme $l=1,\ S=0,\ j=1$ et $l=1,\ S=1,\ j=1$

NB. La notation souvent utilisée est ${}^{2S+1}L_J$

les deux états ci-dessus sont ${}^1P_1$ et ${}^3P_1$ dans cette notation.

9. le deuton contient ${}^3S_1$ et ${}^3D_1$

soit si μ est la projection de J_z $\mathcal{Y}^{\mu}_{011}$ et $\mathcal{Y}^{\mu}_{211}$

10. $\mu = 1$ $|s\rangle = \mathcal{Y}^1_{011} = Y^0_0(\theta,\varphi)\ \chi_{11}$

$|d\rangle = \mathcal{Y}^1_{211} = \sqrt{\frac{1}{10}}\ Y^0_2\ \chi_{11} - \sqrt{\frac{3}{10}}\ Y^1_2\ \chi_{10} + \sqrt{\frac{3}{5}}\ Y^2_2\ \chi_{1,-1}$

11. de parité différente est

$|p\rangle = \mathcal{Y}^1_{111} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\ Y^0_1\ \chi_{11} + \frac{1}{\sqrt{2}}\ Y^{+1}_1\ \chi_{10}$

où les spineurs résultent de la composition de deux spins $\frac{1}{2}$ en $S=1$

soit
$\chi_{11} = \uparrow\uparrow$
$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$
$\chi_{1-1} = \downarrow\downarrow$

12 $\psi = \frac{u(r)}{r}|s\rangle + \frac{w(r)}{r}|d\rangle$

$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \iff \int_0^{\infty} (u^2 + w^2)\, dr = 1$

12. $\vec{S}\cdot\hat{r}$ viole la parité

donc de la forme $\quad \vec{S}\cdot\hat{r}\,|p\rangle = a\,|s\rangle + b\,|d\rangle$

plus généralement dans la base $\quad |s\rangle, |p\rangle, |d\rangle$

$$\vec{S}\cdot\hat{r} = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix}$$

14 donc $\quad (\vec{S}\cdot\hat{r})^2 = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & ab \\ 0 & a^2+b^2 & 0 \\ ab & 0 & b^2 \end{pmatrix}$

et $\quad S_{12} = 6\begin{pmatrix} & & \\ & " & \\ & & \end{pmatrix} - 4\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

NB. $\quad \vec{S}\cdot\hat{r} = \frac{1}{2}\,\vec{\sigma}_1\cdot\hat{r} + \frac{1}{2}\,\vec{\sigma}_2\cdot\hat{r}$

$Q = (\vec{S}\cdot\hat{r})^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\,\vec{\sigma}_1\cdot\hat{r}\;\vec{\sigma}_2\cdot\hat{r}$

$Q^2 = Q \quad$ ce qui était demandé explicitement dans la 1ère version de l'énoncé.

donc les valeurs propres de $(\vec{S}\cdot\hat{r})^2$ sont 0 ou 1.

donc $\quad a^2+b^2=1 \quad$ et pour le bloc 2×2 extérieur $\det = 0$

13. $\left(S_z\cos\theta + \frac{1}{2}S_+\sin\theta\, e^{-i\varphi} + \frac{1}{2}S_-\sin\theta\, e^{+i\varphi}\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,\chi_{11} + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}\,\chi_{10}\right)\right)$

$= a\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,\chi_{11} + b\left[\sqrt{\frac{1}{10}}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)\chi_{11} + \sqrt{\frac{3}{5}}\,\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}\,\chi_{1-1}\right]$

$\theta = 0 \qquad -\sqrt{\frac{3}{2}} = a + \frac{b}{\sqrt{2}}$

termes en $\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}\,\chi_{1,-1} \qquad -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} = b\,\frac{3}{\sqrt{8}}$

d'où $\quad a = -\sqrt{\frac{2}{3}} \quad b = -\sqrt{\frac{1}{3}} \qquad$ d'où $\quad S_{12} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{8} \\ \sqrt{8} & -2 \end{pmatrix}$

pour le sous espace $|s\rangle, |d\rangle$ de parité +

+ généralement $\quad a = -\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \quad b = -\sqrt{\frac{j}{j+1}} \quad$ pour $\quad (\vec{S}\cdot\hat{r})\,|{}^3j_j\rangle = a\,|{}^3(j-1)_j\rangle + b\,|{}^3(j+1)_j\rangle$

et $\quad S_{12} = \begin{pmatrix} -\frac{2(j-1)}{2j+1} & \frac{6\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} \\ " & -\frac{2(j+2)}{2j+1} \end{pmatrix} \quad$ pour $\quad \begin{pmatrix} {}^3(j-1)_j \\ {}^3(j+1)_j \end{pmatrix}$

et $\quad S_{12} = +2 \quad$ pour $\quad |{}^3j_j\rangle$

15.

$$-\frac{\hbar^2}{m} u'' + \left(V_1 + \frac{1}{4} V_2\right) u + \sqrt{8}\, V_4\, w = E\, u$$

$$-\frac{\hbar^2}{m} w'' + \frac{\hbar^2}{m}\frac{6}{r^2} w + \left(V_1 + \frac{1}{4} V_2 - 3V_3 - 2V_4\right) w + \sqrt{8}\, u = E\, w$$

16. Si $\psi = \frac{u(r)}{r} |s\rangle$ on englobe moins d'espace de Hilbert qu'avec $\psi = \frac{u(r)}{r} |s\rangle + \frac{w(r)}{r} |d\rangle$. Donc d'après le principe variationnel, l'énergie est sur-estimée à cette approximation. En pratique c'est pire. L'équation avec $u(r)$ seul et $w = 0$ ne lie pas le deuton. Il faut la composante $|d\rangle$.

17. On rencontre ce cas, croit-on, pour la dynamique lagrangienne-anti-lagrangienne. On a une bonne approximation en diagonalisant S_{12}, et on ne prenant que l'état pour lequel $V_4(r) S_{12}$ est le plus attractif. Notons que ni le terme centrifuge ni le terme $\vec{L}\cdot\vec{S}$ ne sont diagonaux. On néglige le couplage qu'ils induisent entre états propres de S_{12}.