

## Interaction coulombienne dans l'atome d'Hélium – Mécanisme d'échange

Nous allons montrer que le principe de Pauli et l'interaction coulombienne sont responsables d'une interaction effective ferromagnétique entre les spins des électrons de l'atome d'Hélium.

**1/ Problème à un électron : ion  $\text{He}^+$ .**– Quel est le spectre des valeurs propres de l'hamiltonien  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}$  pour l'ion hydrogénoïde ? Comment les états stationnaires sont-ils classés (sans oublier le spin) ? Rappeler les dégénérescences des niveaux.

**Problème à deux électrons : atome  $\text{He}$ .**– Nous nous intéressons maintenant à l'atome d'Hélium dont l'hamiltonien (énergie des deux électrons) est

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{i=1,2} \left( \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \right)}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|}}_W \quad \text{avec } Z = 2 \quad (1)$$

**2/** On note  $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1; \vec{r}_2, \sigma_2) = (\langle \vec{r}_1, \sigma_1 | \otimes \langle \vec{r}_2, \sigma_2 |) | \Psi \rangle$  la fonction d'onde à deux électrons. Quelle propriété de symétrie doit-elle satisfaire ?

Notations :  $|\vec{r}, \sigma\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\vec{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle \in \mathcal{H}_{\text{orb}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$  est une base de l'espace de Hilbert à un électron.  $\vec{r}$  est la coordonnée spatiale et  $\sigma = \pm$  la coordonnée de spin.

**3/ Spectre non perturbé.**– Donner le spectre des valeurs propres de  $\mathcal{H}_0$ .

**4/ Factorisation orbite-spin.**– En vue du traitement de l'interaction coulombienne, il est judicieux de considérer des états factorisés de la forme :  $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1; \vec{r}_2, \sigma_2) = \Phi(\vec{r}_1; \vec{r}_2) \chi(\sigma_1; \sigma_2)$  où  $|\Phi\rangle$ , resp.  $|\chi\rangle$ , est l'état orbital, resp. de spin, des deux électrons.

a) *Partie orbitale.*– Soient  $|\phi_a\rangle$  et  $|\phi_b\rangle$  deux états individuels *orbitaux*. À partir de ces deux états, construire un état symétrique et un état antisymétrique sous l'échange, notés respectivement  $|\Phi_S\rangle$  et  $|\Phi_A\rangle$ .

b) *Partie spin.*– On note  $|S, M\rangle$  les états propres de  $\vec{S}^2$  et  $S_z$ , où  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$  est le spin total des deux électrons. Montrer que  $P_{12}|S, M\rangle = (-1)^{S+1}|S, M\rangle$ , où  $P_{12}$  désigne l'opérateur d'échange (*cf. cours*).

c) *États factorisés.*– Dédurre les deux types d'états factorisés satisfaisant le postulat de symétrisation.

d) Écrire explicitement tous les états quantiques (du type "factorisés") associés aux deux premiers niveaux d'énergie de  $\mathcal{H}_0$ .

Nous étudions maintenant l'effet du terme d'interaction  $W$  sur le spectre des énergies (par la méthode des perturbations).

**5/ État fondamental  $|1s^2\rangle$ .**– Exprimer la correction (au premier ordre en  $W$ ) à l'énergie du fondamental de  $\mathcal{H}_0$  (sous la forme d'une intégrale double).

**6/ Premier niveau excité : état  $|1s^1 2s^1\rangle$ .**– Pour simplifier, nous oublierons l'existence des (douze) états  $|1s^1 2p^1\rangle$ . On note  $|\Psi_{S,M}\rangle$  les quatre états quantiques  $|1s^1 2s^1\rangle$  associés au premier niveau excité de  $\mathcal{H}_0$ , formant une base du sous espace propre  $\mathcal{E}(E_1)$ .

a) Justifier que  $W$  est diagonale dans la base  $|\Psi_{S,M}\rangle$ .

b) Calculer les corrections perturbatives à  $E_1$  au premier ordre en  $W$ . On exprimera le résultat à l'aide de l'intégrale de Coulomb

$$J_{ab} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\phi_a(\vec{r}_1)|^2 \frac{e^2}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} |\phi_b(\vec{r}_2)|^2 \quad (2)$$

et de l'intégrale d'échange

$$K_{ab} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_a(\vec{r}_1) \phi_b(\vec{r}_1)^* \frac{e^2}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \phi_a(\vec{r}_2)^* \phi_b(\vec{r}_2) \quad (3)$$

Analyser les dégénérescences. On admet que l'intégrale d'échange  $K > 0$  (on pourra essayer de le justifier). Faire un diagramme d'énergie. Montrer que l'état triplet de spin est l'état de plus basse énergie et expliquer cela physiquement.

c) Que pensez-vous de la validité de cette approche perturbative ?

d) *Hamiltonien effectif.* – En déduire que, dans le sous-espace  $\mathcal{E}(E_1)$ , l'interaction coulombienne peut être décrite de manière effective par l'Hamiltonien

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = A + B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (4)$$

i.e.  $\mathcal{H}$  et  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  ont les mêmes valeurs propres et vecteurs propres dans  $\mathcal{E}(E_1)$ . Exprimer  $A$  et  $B$  en fonction de  $J$  et  $K$ . Discuter l'effet du signe de  $B$  sur l'état de spin de plus basse énergie.

d) *Ordres de grandeurs.* – Donner l'ordre de grandeur de l'interaction effective entre spins (i.e.  $\hbar^2 B$  ou  $K$  en eV). On rappelle que  $e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \simeq 14,4 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$ .

Comparer à l'ordre de grandeur de l'interaction dipolaire magnétique

$$\mathcal{H}_{\text{DM}} = \frac{\mu_0 \gamma_e^2}{4\pi r_{12}^3} \left[ \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3 \left( \vec{S}_1 \cdot \vec{u}_{12} \right) \left( \vec{S}_2 \cdot \vec{u}_{12} \right) \right] \quad (5)$$

où  $r_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|$  et  $\vec{u}_{12}$  est le vecteur unitaire associé au vecteur  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ . On a introduit le facteur gyromagnétique  $\gamma_e = \frac{g_e q_e}{2m_e}$ . On rappelle que  $\mu_0 \epsilon_0 c^2 = 1$ .

**CORRIGÉ :**

<http://www.lptms.u-psud.fr/membres/texier/> → Enseignement → Licence → Mécanique quantique ou plus directement :

[http://www.lptms.u-psud.fr/userpage/christophe\\_texier/files/2010/05/coulomb\\_Helium\\_corr.pdf](http://www.lptms.u-psud.fr/userpage/christophe_texier/files/2010/05/coulomb_Helium_corr.pdf)