A. Fermions dans une boite: principe de Pauli et introduction à l'énergie d'échange.

On considère deux particules de spin 1/2 interagissant par un potentiel V($|x_1 - x_2|$) et confinées dans une boîte unidimensionnelle de longueur L. L'hamiltonien s'écrit:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\hat{x}_1) + U(\hat{x}_2) + V(|\hat{x}_1 - \hat{x}_2|)$$

où $U(x)$ est le potentiel de confinement, $U(x) = 0$ si $0 < x < L$, $U(x) = \infty$ autrement.

1) Rappeler les états propres et les énergies propres lorsqu'une seule particule est présente dans la boîte. On notera dans la suite $|a>$ et $|b>$ les deux états de plus basse énergie.

2) Les deux particules sont dans la boîte et on néglige d'abord leur interaction mutuelle. Déterminer les deux niveaux les plus bas en énergie. Ecrire les états à deux particules permis par le principe de Pauli pour ces deux niveaux d'énergie.

3) On suppose le potentiel d'interaction suffisamment faible pour être traité de façon perturbative. Donner les niveaux d'énergie les plus bas en présence d'interaction.

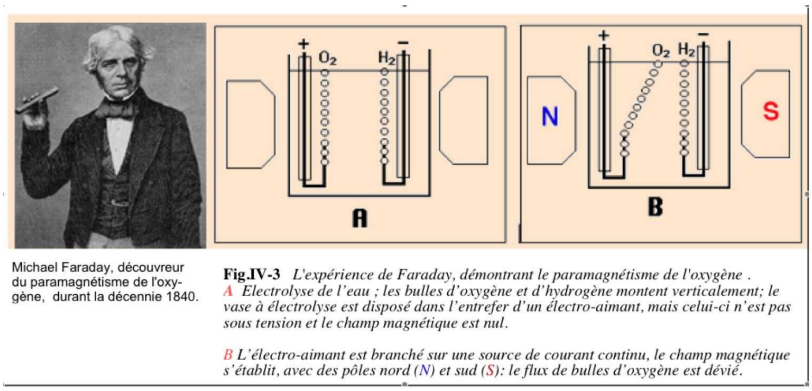
On définit les éléments de matrice: $K_a =< aa|V|aa >$, $K_b =< bb|V|bb >$, $K =< ab|V|ab >$, et $J =< ab|V|ba >$, où on a définit par exemple $|ab>$ par $|ab>= |1:a> \bigotimes |2:b>= |1:a;2:b>$. J est appelé intégrale d'échange.

4) Dans le cas d'une interaction "de contact": $V(|x_1 - x_2|) = V_0\delta(|x_1 - x_2|)$, discuter la nature du premier état excité en fonction du signe de V_0. Dans le cas de deux électrons, expliquer pourquoi l'état triplet permet de minimiser la répulsion coulombienne entre les deux charges (-q).

5) Montrer que de façon purement mathématique, la perturbation sur le premier état excité peut se mettre sous la forme d'une interaction entre les deux spins 1/2 sous la forme: $V^{effectif} = \alpha + \beta\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$. On rappelle que: $2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2$.

6) Adapter cet exercice à l'atome d'hélium (deux électrons et un noyau de charge 2+). On supposera que $E(1s) < E(2s) < E(2p)$ car le potentiel vu par un électron n'est plus central.

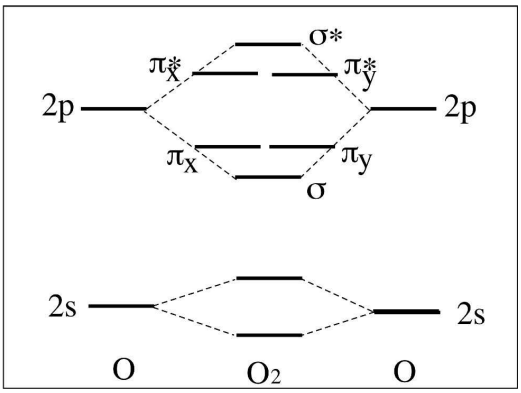
7) Expliquer l'expérience de Faraday prouvant le caractère magnétique (paramagnétique) du dioxygène. On rappelle que l'oxygène possède 8 électrons ($1s^2 2s^2 2p^4$). On donne ci-dessous les niveaux d'énergie de la molécule O_2.



Michael Faraday, découvreur du paramagnétisme de l'oxygène, durant la décennie 1840.

Fig.IV-3 *L'expérience de Faraday, démontrant le paramagnétisme de l'oxygène .*
A Electrolyse de l'eau ; les bulles d'oxygène et d'hydrogène montent verticalement; le vase à électrolyse est disposé dans l'entrefer d'un électro-aimant, mais celui-ci n'est pas sous tension et le champ magnétique est nul.

B L'électro-aimant est branché sur une source de courant continu, le champ magnétique s'établit, avec des pôles nord (N) et sud (S): le flux de bulles d'oxygène est dévié.

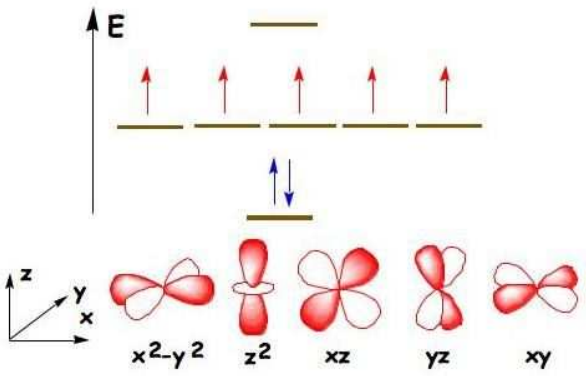


On peut exciter O_2 dans l'état singulet (réaction chimique de l'eau oxygénée avec des oxydants en milieu basique). Une fois produit, le dioxygène singulet peut se désexciter pour redonner le dioxygène triplet, avec émission d'une

belle lumière rouge ou bien réagir avec d'autres molécules qui peuvent à leur tour émettre de la lumière. C'est cette émission qui est souvent utilisée dans les bracelets ou bâtons lumineux vendus pendant les fêtes.

$$O_2 \text{ singulet (excité)} \rightarrow O_2 \text{ triplet (stable)} + \text{énergie lumineuse (rouge)}$$

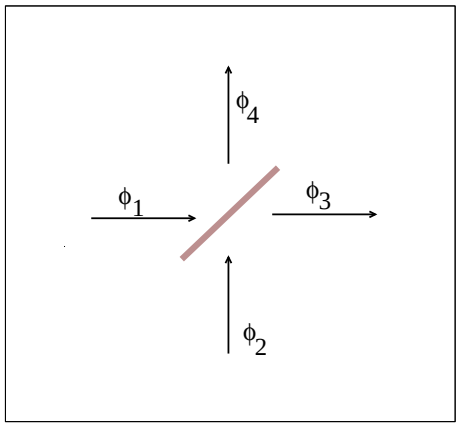
De manière moins anecdoctique, le magnétisme de la matière et l'aimantation permanente de certains matériaux ferromagnétiques (aimants) provient de l'allignement des spins dans les couches 3d incomplètes (règles de Hund).



B. Particules identiques traversant une lame séparatrice. Une particule préparée initialement dans un état (paquet d'onde) $\psi(\mathbf{r}, t_i) = \phi_1(\mathbf{r})$ est envoyée sur une lame séparatrice. Le paquet d'onde transmis s'écrit $\psi(\mathbf{r}, t_f) = (\phi_3(\mathbf{r}) + \phi_4(\mathbf{r}))/\sqrt{2}$ (voir figure). On a $< \phi_3|\phi_4 > \simeq 0$.

On prépare une deuxième particule identique (de même spin) dans l'état $\phi_2(\mathbf{r})$ symétrique spatialement par rapport au plan de la séparatrice. En supposant que initialement $< \phi_1|\phi_2 >= 0$, l'état transmis s'écrit nécessairement $\psi(\mathbf{r}, t_f) = (\phi_3(\mathbf{r}) - \phi_4(\mathbf{r}))/\sqrt{2}$, orthogonal au premier paquet d'onde transmis.

On envoie les deux particules en même temps sur la séparatrice. Montrer que si les deux particules sont des bosons (fermions), elles "ressortent" du même coté (chacune d'un coté) de la séparatrice.



Cette expérience a été réalisée expérimentalement dans le cas de bosons (photons) (Kong et al., University of Rochester, Rochester, New York, 1987).