

## Magnétisme

### I. Hamiltonien d'une électrisation non chargé ( $\vec{E}$ , $\vec{B}$ )

Dans le cas d'un électrisation de masse n et de charge  $q = -e$ , le Hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{c}{2m} \left( \vec{p}_e + e \vec{A}_e \right)^2 - e \phi \quad (1)$$

où  $p_e$  est l'inertie générée de l'électrisation.  
Le terme potentiel résultant du champ de Coulomb  
le rapport à la masse nique ne fait  
en offrant la mobilité  $\kappa$

$$p_e = \frac{e \vec{v}}{\kappa} \text{ en représentation } \vec{r}$$

on obtient le Hamiltonien (opérateur) suivant :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \frac{e^2 \vec{v}}{\kappa} + e \vec{A} \right) \left( \frac{e^2 \vec{v}}{\kappa} + e \vec{A} \right) - e \phi \quad (2)$$

qui appliquée à la fonction d'onde  $\psi$ , donne :

$$\hat{H}\psi = -\frac{e^2}{2m} \Delta \psi - e \phi + \frac{e^2}{\kappa m} \left[ \vec{v} \cdot (\vec{A}) + \vec{A} \cdot \vec{v} \right] + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \psi$$

où  $\vec{v} \cdot (\vec{A}) = \operatorname{div}(\vec{A})\psi = \kappa \operatorname{div} \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{v}$   
en utilisant la jauge de Coulomb  $\operatorname{div} \vec{A} = 0$

On obtient

$$\hat{\nabla} \psi = -\frac{t^2}{2m} \Delta \psi + V \psi + \frac{e}{i\mu} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{e^2 A^2}{2m} \psi \quad (2)$$

on l'on a introduit l'énergie potentielle électrostatique

$$V = -e \phi$$

Supposons que le champ  $\vec{B}$  soit constant et uniforme  
et qu'il tourne orienté selon  $Oz$ .

Dans ce cas,

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad (4)$$

on obtient

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} B y \hat{e}_x + \frac{1}{2} B x \hat{e}_y \quad \text{qui vérifie la forme de Coulomb.}$$

$$\text{D'autre part } \frac{2t}{i} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi = B \frac{t}{i} \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

on introduit le moment cinétique

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

dont la constante selon  $\vec{L}$  s'écrit

$$L_y = x p_y - y p_x$$

en séparant les variables

$$L_y = \frac{p_x}{i} \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

Für element, sei a :

die normale Vierzahl

$$2 \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \cdot \vec{V} \psi = \vec{B} \vec{L} \psi = \vec{B} \cdot \vec{L} \psi$$

$$\text{Dann : } 2 \vec{A} \cdot \hat{p} \psi = (\vec{B} \wedge \hat{n}) \cdot \hat{p} \psi$$

$$= \vec{B} \cdot \left( \hat{n} \wedge \frac{\hat{p}}{i} \right) \psi = \vec{B} \cdot \hat{L} \psi$$

Um aufzuklären das die Expression der  $\hat{L} \psi$  ist  
ein reellenwertiger Ausdruck für

$$A^2 = \frac{\hbar^2}{4} (n^2 + q^2)$$

$$\hat{L} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi + iV \psi + \frac{e}{2m_e} \vec{B} \vec{L} \psi + \frac{e^2 \vec{n}^2}{8m_e} (n^2 + q^2) \psi \quad (5)$$

### II. Momentaufspaltung erläutert.

Sieh die Schrödinger-Gleichung des Kugel  
für Elektronen aus dran.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial r} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi + \frac{e\hbar}{i m_e} \vec{A} \cdot \vec{V} \psi + \frac{e^2}{2m_e} A^2 \psi + V \psi$$

im zylindrischen Raum ist dies hängt mit dem konjuguierten  
 $i\hbar (\psi^* \Delta \psi + \psi \Delta \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{m_e} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) + \frac{e\hbar}{i m_e} \vec{A} \cdot (\psi^* \vec{V} \psi + \vec{V} \psi^*)$   
nicht entgegengesetzt

$$i\hbar \nabla_r \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) + \frac{e\hbar}{i m_e} \vec{A} \cdot \vec{V} \psi^*$$

Conférence de la jauge de Gaußien, on a

$$\vec{A} \cdot \vec{V} |k|^2 = \text{dis}(|k|^2 \vec{A})$$

et d'autre fait

$$\text{dis}(\mu^* \vec{\nu} k - \mu \vec{\nu} \mu^*) = \mu^* \Delta \mu - \mu \Delta \mu^*$$

$$\text{donc } \rightarrow |k|^2 = \text{dis}\left(\frac{i\hbar}{2me}(\mu^* \vec{\nu} k - \mu \vec{\nu} \mu^*) + \frac{e}{me}|k|^2 \vec{A}\right)$$

qui décrit la conservation de la probabilité

$$\rightarrow |k|^2 = \text{dis} \vec{J} \quad (6)$$

où  $\vec{J}$  est le vecteur de courant de probabilité.

En identifiant, on a :

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2me}(\mu^* \vec{\nu} k - \mu \vec{\nu} \mu^*) + \frac{e}{me}|k|^2 \vec{A} \quad (7)$$

où la première termes est un courant diamagnétique qui pent être l'induction et nulle dans le second et un courant diamagnétique induit par  $\vec{B}$  (loi de Lenz)

Suffisance pour l'énergie potentielle V est une  
symétrie sphérique le schéma graphique pour  $N=0$   
est alors de la forme :

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \text{pre}(n) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$\text{ou la } Y_l^m(\theta, \varphi) = f_l^m(\cos\varphi) \text{ est}$$

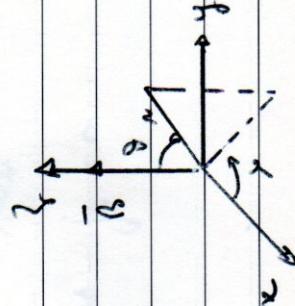
sur les harmoniques sphériques, fonctions propres  
de  $\hat{L}_z$  et  $\hat{L}_r^2$ :

$$\text{et } Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) t^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \text{ si } c[[0, m+1]]$$

$$\hat{L}_r^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = m t^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \quad -t < m < p$$

On note  $f_l^m$   $\therefore f_l^m(n, 0, \varphi)$  fonction propre  
de  $\hat{L}_r^2$ , dont aussi fonction propre de  $\hat{H}$  au  
1<sup>er</sup> ordre en  $\hat{B}$ , autrement dit en négligeant la  
Vitesse en  $\mathbb{R}^2$  dans  $\hat{H}$ .

En coordonnées sphériques



les composants du gradient sont

$$\vec{V} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{1}{\partial y}, \frac{1}{\partial z} \right)^T$$

et le potentiel s'écrit

$$P = \frac{1}{2} \vec{V} \cdot \vec{V} = \frac{1}{2} \partial_x \sin \varphi$$

Evaluons la composante de  $\vec{V}$  en négatif d'après la forme en  $\vec{A}$  dans la formule de Green ( $A, B, C$ ):

$$V_{\text{Nen}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D} \left| \frac{1}{r_{\text{en}}(\theta, \varphi)} \right|^2 = V_{\text{Nen}} \cdot \epsilon_n$$

Car  $\vec{A} \cdot \vec{e}_n = 0$  alors  $f_n = 0$

$$V_{\text{Nen}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D} \frac{1}{r_{\text{en}}^2(\cos \theta, \cos \varphi)} = \\ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \vec{V}_{\text{Nen}} \cdot \vec{e}_n$$

Car  $\vec{A} \cdot \vec{e}_n = 0$  alors  $f_n = 0$

$$Y_{\text{magn}} \vec{V}_{\text{magn}}^* \cdot \vec{e}_p = \frac{\rho e^2}{4\pi} \left( \frac{\rho \cos \theta}{r} (\cos \theta) \right)^2 (-i \sin \theta)$$

$$= -i \sin \theta \left| \frac{\vec{e}_{\text{magn}}}{r \sin \theta} \right|^2$$

$$= -\frac{e^2}{r^2 \sin \theta} \vec{V}_{\text{magn}} \cdot \vec{e}_p$$

$$\text{Comme } \vec{A} \cdot \vec{e}_p = \frac{1}{2} B r \sin \theta$$

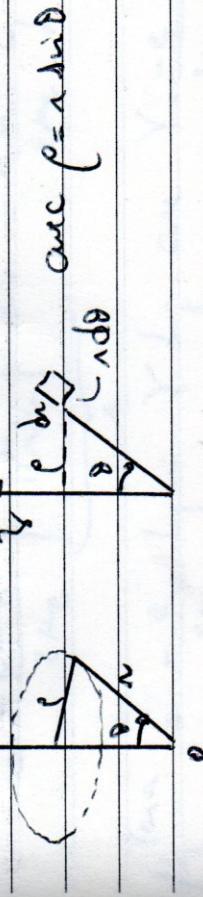
$$\text{Alors } \vec{e}_p = \frac{r \sin \theta}{B r} \vec{V}_{\text{magn}} + \frac{e \beta}{2 r \sin \theta} \vec{n} \sin \theta \vec{k}_{\text{ext}} \quad \textcircled{d}$$

le segment magnétique associé à une boulée de conducteur I, de surface S orientée  $\rightarrow \vec{n} = \vec{I} \wedge \vec{s}$

I le moment orbital du bobineau  
On nomme la constante des

spins élémentaires de rayon  
 $r = r \sin \theta$  et de section  $dT = \pi dr$   
parcourus par une intensité :

$$dI = -e \int_p dr$$



on a donc

$$\mu_3 = \int_{-\infty}^{\infty} -e^{j\tau} \pi r^2 \sin^2 d\tau \quad (9)$$

$$\text{ou } n \in [0, +\infty) \text{ et } \theta \in [0, \pi]$$

Evaluons la combinaison au sens où paraît la périodicité de la fonction  $R = 0$  à une échelle  $\lambda_m$ , correspondant à une périodicité de  $L_f$  égale à  $nL$ :

$$\hat{\mu}_3 \lambda_m = nL_f \lambda_m = L_f \lambda_m$$

lors de alors donnée par le premier terme de l'expression de la périodicité:

$$\hat{\mu}_3 = -\frac{e^{jnL}}{2\pi} \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} e^{j\tau} \sin^2 d\tau}_{(10)}$$

$$2\pi e^{j\tau} d\tau = 2\pi$$

$$= -\frac{e^{jnL}}{2\pi} \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} 1 d\tau}_{1} = -\frac{e}{2\pi} \lambda_m \quad (10)$$

$$\mu_3 = -\frac{e}{2\pi} \lambda_m = Y L_f \text{ avec } Y = \frac{-e}{2\pi} < 0$$

on nous avons introduit la rapport gyro magnétique orbital

$$Y = -\frac{e}{2me} \quad (12)$$

10/3/2021

Donc l'expression de  $\hat{H}_1$ , le terme linéaire en  $\vec{B}$  qui s'écrit  $\frac{e}{2me} \vec{B} \cdot \vec{L}_1$ , devient donc

l'interaction entre le moment magnétique et l'inducteur :

$$\text{Force } \vec{F}_m = \frac{\mu_0}{2me} \frac{eB}{2me} L_1 \cdot \vec{B} d\tau = \frac{eB}{2me} m\vec{t} = -\frac{1}{2me} \vec{p}_{mag}$$

on peut encore écrire :

$$\vec{p}_{mag} = -\mu_0 \mu_B \text{ avec } \mu_B = \frac{e\hbar}{2me} \quad (12)$$

on peut alors introduire la quantité de mesure magnétique appellé magneton de Bohr

Donc un état  $S$  ( $\ell=0, m_\ell=0$ ), le moment global n'est pas nul. Il est en effet de même pour une couche cylindrique dont le moment global est proportionnel à

$$\sum_m \mu_m = 0$$

L'axe de quantification  $Y$  étant orthogonale,

$$\text{on a } \mu_{\text{plan}} = -Y \int_0^L$$
 (13)

le moment d'inertie plan est opposé au moment d'inertie.

Calculons maintenant le moment d'inertie plan pour l'axe  $B$  à l'origine et en perspective. On effectue le second moment de  $\Omega$ , linéaire en  $B$ , dans l'extension du moment  $\Omega$ , en déduire

$$\mu_{\text{plan}} = -e^2 k \int_{\text{aire}} \left( \frac{1}{r_{\text{aire}}} \right)^2 \sin^2 \theta \pi r^2 dr$$
 (14)

pour l'orbite  $k$ .

Le deuxième membre est donc en somme du  $\mu_{\text{aire}}$  des états occupés.

$$\mu_{\text{aire}} = -e^2 \sum_{\text{état occupé}} \left( \frac{1}{r_{\text{aire}}} \right)^2 \int_{\text{aire}} dr$$
 (15)

Comme les états d'ondes sont munies, pour un atome de nombre  $Z$ ,

$$Z = \sum_{\text{état occupé}} \left( \frac{1}{r_{\text{aire}}} \right)^2 dr$$
 (16)

on a

$$\mu_{\text{3,1st}}^{\text{dia}} = -\frac{ze^2B}{4\pi e} \quad (17)$$

on va introduire la valeur moyenne :

$$\bar{e}^2 = \frac{1}{2} \sum_{\text{élect}} \left( e^2 |K_{\text{elect}}|^2 \right) \text{dt} \quad (18)$$

occupé

Pour une distribution de charge à symétrie sphérique :

$$\bar{e}^2 = x^2 + y^2 = \frac{2}{3} \bar{r}^2$$

Finalement, on peut écrire :

$$\mu_{\text{3,1st}}^{\text{dia}} = -\frac{ze^2\bar{r}^2}{6\pi e} B \quad (19)$$

Le moment diamagnetique orbital est opposé à  $\vec{B}$  et il diminue linéairement indépendant de la température.

Il se lit facilement sur graphique que pour un certain axe de courbe complexe pour lequel  $\mu_3 = 0$

Aller à la page suivante

le champ des forces extérieures nécessaires pour déplacer un conducteur dans une induction à vitesse constante est égal à :

$$\vec{F}_m = -\vec{\mu} \cdot d\vec{s} = -\mu_1 ds \quad (20)$$

avec  $\vec{\mu}_1$  donné par (19), on obtient :

$$E_m^{\text{ext}} = - \int_{\mu_1}^B \text{dia}(B) dB = \frac{e^2 B^2}{8\mu_0} \left( \frac{1}{B_0} + \frac{1}{B} \right) \quad (21)$$

Cette énergie et la moyenne des vitesses  $V_m$  du volume  $V_m$  dans  $H$  sont suffisantes pour une méthode des différences pour le calcul de  $\vec{H}_s$ .

D'après (20)  $\mu_1 = -\frac{E_m}{ds}$  où  $E_m$  est la moyenne des vitesses de polarisation utilisées pour l'induction dans le Hallétoïde.

$$E_m = \frac{eB}{2\mu_0} \int_{\mu_1}^B V_m \ln \frac{V_m}{V_0} dB + \frac{eB^2}{8\mu_0} \left[ \frac{1}{B_0} \ln \frac{1}{B_0} \right] dB \quad (22)$$

$$\text{donc } \vec{H}_s \text{ dans } \mu_1 = -\frac{e}{2\mu_0} \vec{n} \times \frac{e^2 B}{4\mu_0} \left( \frac{1}{B_0} \right) \text{ dans en accord avec (12) et (14)}$$

On l'ordre en  $\vec{B}$ , l'énergie magnétique de l'électron est donnée par la formule de (22)

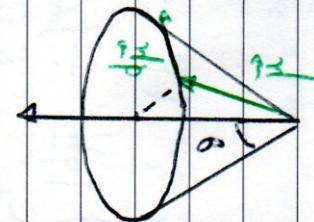
$$E_m = \mu_0 \mu_B = \mu_0 \hbar \omega_L + \delta(\vec{B}')$$

$$\text{ou } \omega_L = \frac{e\vec{B}}{2m} \text{ et la fréquence de Larmor.}$$

La dégénérence de l'état de un différentiel est levée par l'induction, c'est l'effet Zeeman.

$$\begin{array}{c} m=+1 \\ \downarrow \quad \uparrow \\ \mu_0 \hbar \omega_L = \mu_B \quad m=0 \\ \downarrow \quad \uparrow \\ \vec{B}=0 \qquad \qquad \qquad \vec{B} \end{array} \quad \begin{array}{c} m=-1 \\ \uparrow \quad \downarrow \\ \mu_0 = -1 \end{array}$$

Rem : La fréquence de Larmor a une intensification dans le cas où le moment magnétique placé dans une induction  $\vec{B}$  subit un couple  $\vec{\tau}$  à  $\vec{B}$  induit par induction.



Le théorème du moment cinétique donne l'équation du mouvement :

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\tau} \wedge \vec{B}$$

$$\text{on envoie, en utilisant (13) } \frac{d\vec{L}}{dt} = -|\vec{V}| \vec{p} \wedge \vec{B} \quad (23)$$

$$\text{en } \frac{d\bar{\mu}}{dt} = 2\bar{\mu} \cdot \frac{d\bar{\alpha}}{dt} = -2|\gamma| \bar{\mu} \cdot (\bar{\mu} \wedge \bar{\beta}) = 0$$

$$\Rightarrow |\bar{\mu}| = c^t$$

$$\text{et } \frac{d\bar{\mu}}{dt} \cdot \bar{\beta} = -|\gamma|(\bar{\mu} \wedge \bar{\beta}) \cdot \bar{\beta} = 0 \Rightarrow d\bar{\mu} \perp \bar{\beta}$$

$$\frac{d}{dt}(\bar{\mu} \cdot \bar{\beta}) = \bar{\mu} \wedge \frac{d}{dt} \cos \theta = \frac{d\bar{\mu}}{dt} \cdot \bar{\beta} = 0 \Rightarrow \theta = ct$$

L'orthogonalité de  $\bar{\mu}$  décrit un cercle de circumference  $2\pi$  dans l'axe  $\bar{\beta}$ .  
En prenant la norme de (23), on obtient :

$$|\bar{\mu}| = |\gamma| \mu_0 \sin \theta$$

$|\bar{\mu}|$  est l'élément d'une décrit par l'extériorité de  $\bar{\mu}$ .

Soit  $T$  la période de la jécumion, on a :

$$\int_T |\bar{\mu}| = |\gamma| \mu_0 \sin \theta T = 2\pi \mu_0 \sin \theta$$

$$\text{donc son time } T = \frac{2\pi}{|\gamma| \mu_0} \text{ de sorte que}$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{e\beta}{2\mu_0} = \omega_c$$

Le moment jécumie au bout de  $T$  à la fin de l'oscillation.

Moment magnétique de spin et couple Spin-Selby.

L'électron possède un spin  $\frac{1}{2}$ , moment magnétique propre auquel est associé un moment magnétique de couple :

$$\hat{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \hat{S}_s \quad (24)$$

selon l'axe de quantification  $O_z$ .

Le rapport gyroélectrique de spin  $\gamma_s = -\frac{e}{mc}$  est le double du rapport orbital  $\gamma$ .

Le moment de spin introduit dans le Hamiltonien un terme zéroem:

$$\hat{H}_s = -\beta_s \cdot \hat{\mu}_s = \frac{e}{mc} \beta_s \hat{S}_s \quad (25)$$

Par le spin  $\lambda = \frac{1}{2}$ , on a les équations aux valeurs propres :  $\hat{S}_z \alpha(\mu_S) = \mu_S \text{ th } \alpha(\mu_S) \quad \mu_S = \pm \frac{1}{2}$

$$\text{et } \hat{S}_x \alpha(\mu_S) = \Delta(\delta+1) \text{ th}^2 \alpha(\mu_S) = \frac{3}{4} \text{ th}^2 \alpha(\mu_S) \quad (26)$$

On voit que la combinaison de l'énergie magnétique due

$$\epsilon_m^s = \mu_S \text{ eth } \beta = 2 \mu_S \text{ ph } \beta = \mu_S \text{ th } \omega_c \quad (27)$$

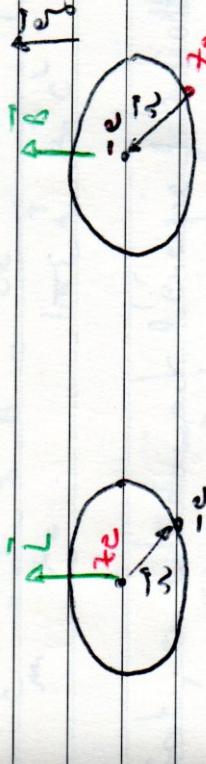
où l'on intègre la fréquence cyclotron de l'électron

$$\omega_c = eB/m_e$$

Dans l'électrostatique, la lame énergie, le moment de l'impulsion est conservé.

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{1}{2} p_x & \quad \mu_B = \frac{1}{2} h \\ B = 0 & \quad \downarrow \quad \uparrow \quad \text{électrostatique} \\ \lambda = -\frac{1}{2} p_x & \quad \mu_B = -\frac{1}{2} h \quad \text{électrostatique} \\ B & \quad \uparrow \quad \downarrow \quad \text{lame énergie} \end{aligned}$$

Considérons le mouvement planéaire d'un électron de vitesse  $v = \omega r$  dans une solide circulaire de rayon  $r$  centrée sur le moyen de champ  $Z_e$



repère du moyen moyen repère de l'électron

Dans le repère de l'électron, à la charge  $Ze$  due au moyen en rotation à la fréquence angulaire  $\omega$  est associé une intensité :

$$I = \frac{ze\omega}{2\pi}$$

$$\text{dans une induction: } d\vec{B} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \frac{d\vec{l}}{r^3}$$

en intégrer, on obtient

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{zeu}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \frac{ze}{mc^2} \text{ poudre}$$

mais on a q, tout enroulé

$$\vec{B} = \frac{ze}{4\pi r^3 mc^2} \vec{L}$$

ou  $\vec{L}$  est le moment cinétique orbital de l'é-

d'épin (es), l'énergie Spin-orbite de l'é-

$$e_{so} = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{ze^2}{4\pi r^3 mc^2} \frac{1}{c} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\text{Soit, en introduisant l'énergie potentielle élastique}$$

$$V(r) = -\frac{ze^2}{4\pi r}$$

$$E_{so} = \frac{1}{mc^2} \frac{1}{r} \nabla \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Un travail relativiste vaudrait un facteur correctif  
et dû à la présence de Thomas

$$E_{\mu} = \frac{1}{2} \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{\sim m} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (28)$$

le couple Afin - onde résultant donc un terme d'apport dans le Hamiltonien

$$\vec{H}_{so} = - T_{so} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (29)$$

IV Moment cinétique total, produit de Landé n'importe de Hund.

Dès l'absence, le moment cinétique (orbital et spin) sont donnés par :

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \text{ et } \vec{S} = \sum_i \hat{\vec{s}}_i \quad (30)$$

où la norme des étoffes occupées est valable  
aux couches incomplètes la contribution de  
couches complètes étant nulle.

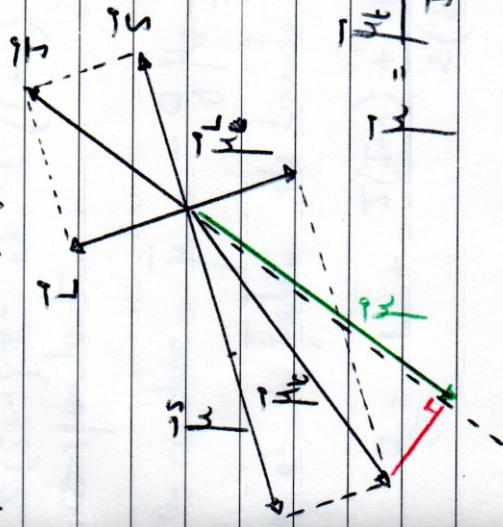
$$\begin{aligned} \text{Au moment cinétique total } \vec{T} &= \vec{L} + \vec{S} \quad (31) \\ \text{est associé un moment magnétique total } \vec{\mu}_T &= Y \hat{\vec{L}} + Y_s \hat{\vec{S}} = Y \left( \hat{\vec{L}} + 2 \hat{\vec{S}} \right) \quad (32) \end{aligned}$$

$$\text{avec } Y = \frac{-e}{2me}$$

A cause du caractère affin-ohlique,  $\vec{L}$  et  $\vec{S}$  ne sont pas des vecteurs dans le plan des moments, mais le moment cinétique total  $\vec{J}$  est conservé.

Noter que  $[L, \vec{L} \cdot \vec{S}] \neq 0$ ,  $[L^2, \vec{L} \cdot \vec{S}] = 0$  et  $[S^2, \vec{L} \cdot \vec{S}] = 0$ .

Donc une description claire ne peut être faite en termes de la direction de  $\vec{J}$  que lorsque nous projettions sur  $\vec{J}$  et observons



$$\vec{\mu} = \frac{\vec{\mu}_L \cdot \vec{J}}{J} \frac{\vec{J}}{J} = Y(L^2 + 2\vec{S}^2) \frac{\vec{J}}{J^2}$$

$$\text{et } \vec{L} \cdot \vec{J} = L^2 + \vec{L} \cdot \vec{S} \text{ et } \vec{S} \cdot \vec{J} = \vec{L} \cdot \vec{S} + S^2$$

$$\text{et } \vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\Rightarrow \vec{L} \cdot \vec{J} = \frac{\vec{J}^2 - L^2 - S^2}{2}$$

$$\Rightarrow \vec{L} \cdot \vec{J} = \frac{\vec{J}^2 + L^2 - S^2}{2} \text{ et } \vec{S} \cdot \vec{J} = \frac{\vec{J}^2 - L^2 + S^2}{2}$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = Y \left( 1 + \frac{L^2 - L^2 + S^2}{2 \vec{J}^2} \right) \frac{\vec{J}}{J}$$

$$\text{or } Y = \frac{-e}{2440}, \text{ on en déduit que}$$

$$\bar{\mu} = -\mu_k \left( 1 + \frac{T^L - L^2 + S^2}{2T^L} \right) \frac{T}{t_k}$$

Pour obtenir le résultat quadratique, on remplace  
 $\bar{\mu}_k$  par  $\bar{\mu}_k^2$  et  $L^2$  par le même rapport  $T(T+1)t_k^2$ ,  
 $S(T+1)t_k^2$  et  $L(L+1)t_k^2$  de manière  
correspondante.

$$\text{On a alors } \bar{\mu} = -g \mu_k \frac{T}{t_k} \text{ où} \quad (33)$$

$g$  est le facteur de l'onde d'eau par

$$g_T = 1 + \frac{T(T+1)}{2(T)(T+1)} + \frac{S(T+1)}{2(T)(T+1)} - \frac{L(L+1)}{2(T)(T+1)} \quad (34)$$

Rem: voir le complément D, du livre de  
Cohen-Tannoudji sur la théorie de  
l'harmonie.

Exercice: calculer le facteur quadratique du pétén de l'onde de l'eau

Exercice: calculer le facteur de l'onde d'eau pour un échelle de l'onde  $T = \frac{1}{2}$

$$\text{et } g_T = 2 \equiv g$$

## Lignes de Hund.

pour les ions de Vens (Na, Sr, Ca... )  
dans la couche 4f et incertitude, la valeur du  
moment cinétique global est donnée en ajoutant  
la valeur de l'ion.

Il est alors fondamental de bien se faire que

- ① le spin global S prend la valeur maximale  
pour le principe de Pauli.
- ② le moment cinétique orbital L prend la  
valeur maximale pour la règle de Pauli.
- ③ le moment cinétique global  $T = \sqrt{L^2 + S^2}$   
suivant la couche et moins que deux fois  
de  $L + S$  au maximum.

La 1<sup>re</sup> règle est la conséquence du principe d'exclusion  
et de la répartition de Compton entre l'électrons.  
Deux électrons de spin ne pouvant être  
localisés au même endroit, à l'exception de  
Comptons ils plus facile pour ce de spins parallèles.

La règle de Hund résulte du signe des couplages spin-orbite favorisant  $L$  et  $J$  antiparallèles ( $J = L - S$ ). lorsque la couche se trouve qu'à deux-lignes est parallèle au delà ( $J = L + S$ ) dans le cas pérpendiculaire.

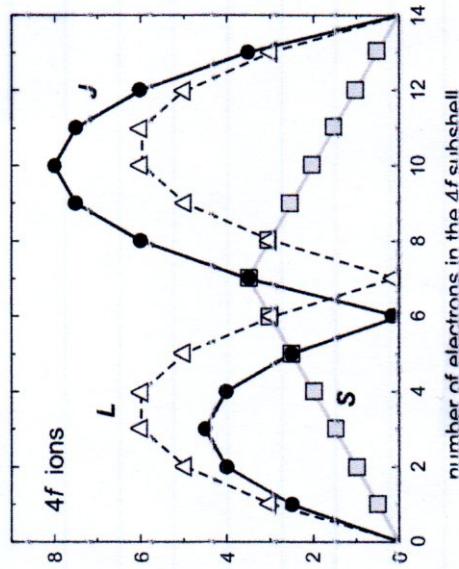
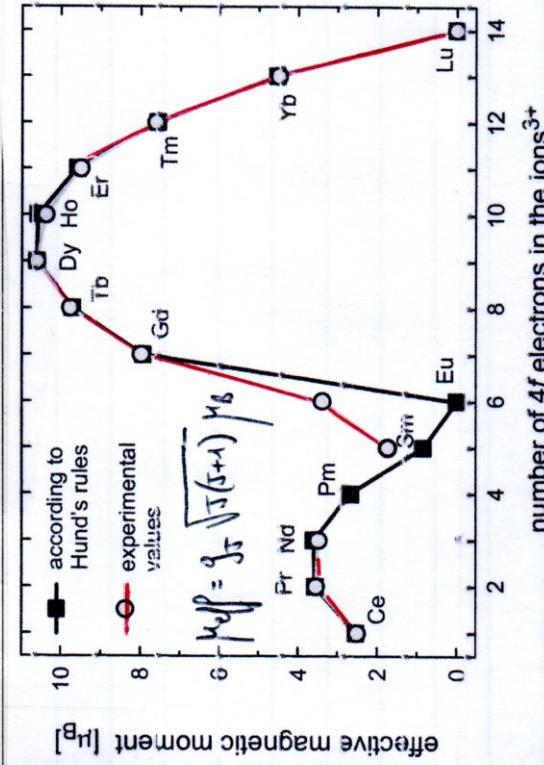


Fig. 2.5. Values of  $S$ ,  $L$ , and  $J$  for  $4f$  ions according to Hund's rules



Exo 2 = calculer  $S$ ,  $L$ ,  $T$ ,  $g_J$  pour les ions

$$T_{\text{re}}^{3+} \left( 4f^1 5s^2 5p^1 \right) \text{ et } Nd^{3+} \left( 4f^3 5s^2 5p^1 \right)$$

la couche conflictive participe pas au magnetisme

l'ion ne possède une couche  $f$ ,  $f=3$  et  
 $m_S \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$  - l'effacement du 2nd règle de  
Hund conduit aux occupations suivantes  
pour la couche  $4f$  incomplète.

$$\begin{array}{ccccccccc} m_S & 3 & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 & -3 \\ T_{\text{re}}^{3+} & \uparrow \downarrow & \uparrow \end{array}$$

$$Nd^{3+} \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$$

d'où pour  $_{\text{re}}^{3+}$   $S=1$      $L=5$      $T=L+S=6$  car  
plus qu'à demi-plein     $g_J = 1.167$

pour  $Nd^{3+}$   $S=\frac{3}{2}$      $L=6$      $T=L+S=\frac{9}{2}$   
car moins qu'à demi-plein     $g_J = 0.117$

## Fourier transform de l'impulsion et de l'onde

Exercice : fourier transforme de l'impulsion (classeur)

Sont donné la fonction périodique de période  $T$  et l'aire  
dans une induction  $B$ . Calculer le vecteur moyen  
classeur des moments à l'oscillation  $T$  et sa  
densité linéaire.

à l'exception du périodique est du type  $\cos \omega t$   
et pour :

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \omega t = \mu_1 B$$

$$\bar{\mu}_1 = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \mu_1 e^{-j\omega t} dt \text{ avec } z = \int e^{-j\omega t} dt$$

avec  $\mu_1 = \mu \cos \omega t$  et  $dt = i\pi \sin \omega t d\theta$ ,  $\theta \in [0, \pi]$

$$\bar{\mu}_1 = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial z}{\partial(\theta)} = + \frac{1}{2} \frac{\partial z}{\partial(\theta)} \ln z = + \mu \frac{1}{2} \ln z$$

où  $z = \exp(+j\beta \mu B \cos \theta)$

$$z = \exp(j\beta \mu B \cos \theta) = \exp(j\beta \mu B \cos \theta)$$

on pose  $u = \cos \theta$  donc  $= -\sin \theta$

$$z = \int_{-1}^1 \exp(j\beta \mu B u) du = \frac{1}{j\beta \mu B} \left[ \frac{1}{u} \right]_{-1}^1$$

$$\bar{\mu}_1 = +\mu \frac{1}{2} \frac{1}{\beta \mu B} (\ln \frac{1}{-1} - \ln 1) = \mu \left( \coth \frac{\pi \beta \mu B}{2} - \frac{j\pi}{\beta \mu B} \right)$$

Dans la limite des champs faibles  $\frac{\mu_0 H}{kT} \ll 1$

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + O(x^3)$$

$$\bar{\mu}_j \approx \mu \left( \frac{1}{3} \frac{\mu_0 n}{kT} \right) = \frac{1}{3} \frac{\mu_0 n}{kT} = x \frac{\beta}{\mu_0} = xH$$

d'où l'expression de la susceptibilité :

$$\chi = \frac{\mu_0 \mu'}{3 k T} = \frac{C}{T} \quad \text{loi de Curie}$$

avec  $C = \frac{\mu_0 \mu'}{3 k_B}$  et la loi de Curie : (35)

Exercice : pour une matrice de Schrödinger (quadrupole)

Calculer les valeurs propres de l'hamiltonien d'un atome en présence d'un champ (induction)  $\vec{B}$  :

en diédrale dans le sens de  $\vec{J}_1$  en champ faible puis dans le cas général.

On utilise la méthode  $\sum_{m_J=-J}^J m_J^2 = J(J+1)(2J+1)$

$$\text{d'après (33)} \quad \tilde{\mu} = -g \mu_B \frac{\vec{J}}{kT} \quad \text{c'est à dire de Landé} \\ \hat{H} = -\tilde{\mu} \cdot \vec{B} = g \mu_B \frac{\vec{J}_1}{kT}$$

$$\hat{H} |J m_J\rangle = \mu_J g \mu_B \beta |J m_J\rangle, \quad m_J \in \{-J, J\}$$

On a :

$$T_J = \frac{1}{2} \sum_{\mu_J = -J}^J -g \mu_B \mu_J$$

$$\text{avec } T = \sum_{\mu_J = -J}^J -g \mu_B \mu_J$$

Donc fin de chaîne parallèle  $\frac{g \mu_B J}{k_B T} \ll 1$

$$\bar{\mu}_J \approx 1 \sum_{\mu_J = -J}^J -g \mu_B \mu_J \left( 1 - \frac{g \mu_B \mu_J}{k_B T} \right) + g \left( \frac{\mu_B}{k_B T} \right)^2$$

$$\text{et } T \approx \sum_{\mu_J = -J}^J \left( 1 - \frac{g \mu_B \mu_J}{k_B T} \right) + g \left( \frac{\mu_B}{k_B T} \right)^2$$

$$\text{en utilisant } \sum_{\mu_J = -J}^J 1 = 2J+1 \text{ et } \sum_{\mu_J = -J}^J \mu_J = 0$$

$$\text{et } \sum_{\mu_J = -J}^J \mu_J^2 = \frac{J(J+1)(2J+1)}{3}$$

$$\text{on obtient } \bar{\mu}_J = \frac{g^2 J(J+1) \mu_B}{3 k_B T} = \chi H = \chi \frac{B}{\mu_0}$$

en comparant avec le modèle d'ampère, on définit

$$\mu_{eff} = g \sqrt{J(J+1)} \mu_B \text{ et } \chi = \frac{C}{T} = \frac{\mu_0 \mu_B}{3 k_B T}$$
  
$$= \frac{1}{\mu_0}$$

$$\text{ou } p = g_J \sqrt{J(J+1)} \quad \text{avec } g_J = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Rem : en prenant la susceptibilité en fonction de l'espacement entre les niveaux de spins qui peut être confondu à la valeur théorique déduite de l'application du critère de Hund.

**Table 4.6.** The  $4f$  ions. The paramagnetic moment  $m_{eff}$  and the saturation moment  $m_0$  are in units of  $\mu_B$

$4f^n$	$S$	$L$	$J$	$g$	$m_0 = gJ$	$p = g\sqrt{J(J+1)}$	$p \exp$
1	Ce <sup>3+</sup>	$\frac{1}{2}$	3	$\frac{5}{2}$	$\frac{6}{7}$	2.14	2.54
2	Pr <sup>3+</sup>	1	5	4	$\frac{4}{5}$	3.20	3.58
3	Nd <sup>3+</sup>	$\frac{3}{2}$	6	$\frac{9}{2}$	$\frac{8}{11}$	3.27	3.52
4	Pm <sup>3+</sup>	2	6	4	$\frac{3}{5}$	2.40	2.68
5	Sm <sup>3+</sup>	$\frac{5}{2}$	5	$\frac{5}{2}$	$\frac{2}{7}$	0.71	0.85
6	Eu <sup>3+</sup>	3	3	0	0	0	0
7	Gd <sup>3+</sup>	$\frac{7}{2}$	0	$\frac{7}{2}$	2	7.0	7.94
8	Tb <sup>3+</sup>	3	3	6	$\frac{3}{2}$	9.0	9.72
9	Dy <sup>3+</sup>	$\frac{5}{2}$	5	$\frac{15}{2}$	$\frac{4}{3}$	10.0	10.65
10	Ho <sup>3+</sup>	2	6	8	$\frac{5}{4}$	10.0	10.61
11	Er <sup>3+</sup>	$\frac{3}{2}$	6	$\frac{15}{2}$	$\frac{6}{5}$	9.0	9.58
12	Tm <sup>3+</sup>	1	5	6	$\frac{7}{6}$	7.0	7.56
13	Yb <sup>3+</sup>	$\frac{1}{2}$	3	$\frac{7}{2}$	$\frac{8}{7}$	4.0	4.53

le dissociation pour Eu et lié à l'énergie d'un état excité avec  $J \neq 0$  poche du fondamental

Sur les ions de la série de transition, le tableau suivant nous donne :

Table 4.7. The 3d ions.  $m_{eff}$  is in units of  $\mu_B$

$3d^n$		$S$	$L$	$J$	$g$	$\int = g\sqrt{J(J+1)}$	$g\sqrt{S(S+1)}$	$\mu_{eff}^{exp}$
1	Ti <sup>3+</sup> , V <sup>4+</sup>	$\frac{1}{2}$	2	$\frac{3}{2}$	$\frac{4}{5}$	1.55	1.73	1.7
2	Ti <sup>2+</sup> , V <sup>3+</sup>	1	3	2	$\frac{2}{3}$	1.63	2.83	2.8
3	V <sup>2+</sup> , Cr <sup>3+</sup>	$\frac{3}{2}$	3	$\frac{3}{2}$	$\frac{2}{5}$	0.78	3.87	3.8
4	Cr <sup>2+</sup> , Mn <sup>3+</sup>	2	2	0		4.90	4.9	
5	Mn <sup>2+</sup> , Fe <sup>3+</sup>	$\frac{5}{2}$	0	$\frac{5}{2}$	2	5.92	5.92	5.9
6	Fe <sup>2+</sup> , Co <sup>3+</sup>	2	2	4	$\frac{3}{2}$	6.71	4.90	5.4
7	Co <sup>2+</sup> , Ni <sup>3+</sup>	$\frac{3}{2}$	3	$\frac{9}{2}$	$\frac{4}{3}$	6.63	3.87	4.8
8	Ni <sup>2+</sup>	1	3	4	$\frac{5}{4}$	5.59	2.83	3.2
9	Cu <sup>2+</sup>	$\frac{1}{2}$	2	$\frac{5}{2}$	$\frac{6}{5}$	3.55	1.73	1.9

On constate un meilleur accord avec la valeur  $2 \sqrt{S(S+1)}$  obtenue en supposant qu'il n'y a pas de contribution orbitale au moment magnétique que pour les éléments de transition, le moment circulaire orbital est bloqué.

La différence de comportement avec la Terre nous vient du fait que, contrairement à la couche 4f, lorsque l'atome contient des sous-couches 3d et 4p, il peut conserver son nombre à l'environnement,

La couche 3d du élément de transition et une couche externe, nommée à l'intermédiaire la couche voisine des Crustal (champ cristallin) qui forme le niveau cristallin en lit de l'ion.

En revanche pour les ions Al<sup>3+</sup>:

- La couche d'ions au sein des molécules comporte un échangeur offrant une certaine souplesse.
  - Seule la couche superficielle présente un niveau cristallin.
  - Le niveau superficiel est relié au niveau cristallin par la relation
- $$\mu = - q \mu_s \frac{t}{T}$$
- pour une configuration électronique donnée, les valeurs de  $\frac{t}{T}$  et de  $q$  sont données par la règle de Hund.
- Ce dernier point doit être modifié pour les ions dans un solide
- ① le moment orbital pour les ions 3d du bloquage le plus grand possible, il est donné par  $t = 9/16 \bar{s}$  que  $q = 2$ .
  - ② certaines directions possède des axes de perturbation.
- ③ et ④ sont due au champ électrostatique des 3 nôuds.

Exercice : fonctionnelle de Brillouin pour une antenne de champ quelconque

$$\text{On introduit } a = \frac{g\mu_B B}{2\pi}, \text{ on a}$$

$$\bar{\mu}_j = g\mu_B \frac{\partial}{\partial a} \ln \left( \sum_{m_j=-J}^J e^{-\alpha m_j} \right)$$

$$\text{ou } \sum_{m_j=-J}^J e^{-\alpha m_j} = \frac{\text{Fn}(2J+1) \frac{a}{2}}{\sin \frac{a}{2}}$$

$$\text{On a } \bar{\mu}_j = g\mu_B \frac{\partial}{\partial a} \left( \ln \text{Fn}(2J+1) \frac{a}{2} - \ln \sin \frac{a}{2} \right) \\ = \frac{g\mu_B}{2} \left[ (2J+1) \coth \left( \frac{g\mu_B B}{2\pi} \right) - \coth \left( \frac{g\mu_B B}{2\pi} \right) \right] \quad (36)$$

$$\text{On a } \bar{\mu}_j = g\mu_B \tau \beta_j \left( \frac{g\mu_B B \tau}{2\pi} \right) \text{ avec}$$

$$\beta_j(x) = \frac{2^{J+1}}{2J} \coth \left( \frac{2J+1}{2J} x \right) - \frac{1}{2J} \coth \left( \frac{x}{2J} \right)$$

qui est la fonction de Brillouin

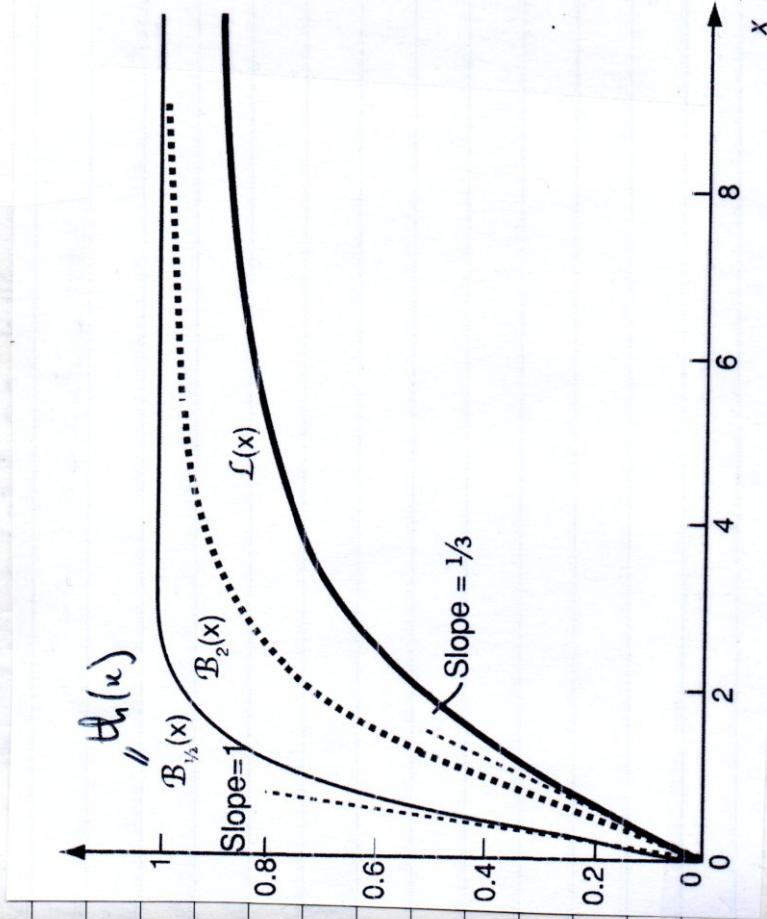
lorsque  $x \rightarrow 0$

$$\beta_j(x) \sim \frac{2^{J+1}}{2J} x + \mathcal{O}(x^3)$$

On peut vérifier que pour un filin  $\frac{1}{2}$  ( $\tau = \varsigma = \frac{1}{2}$ ,  $\eta = 2$ )

$$\text{On a } \bar{\mu}_3 = \mu_3 \text{ th} \left( \frac{\mu_3 s}{\epsilon r} \right)$$

• Fonction de Brillain.



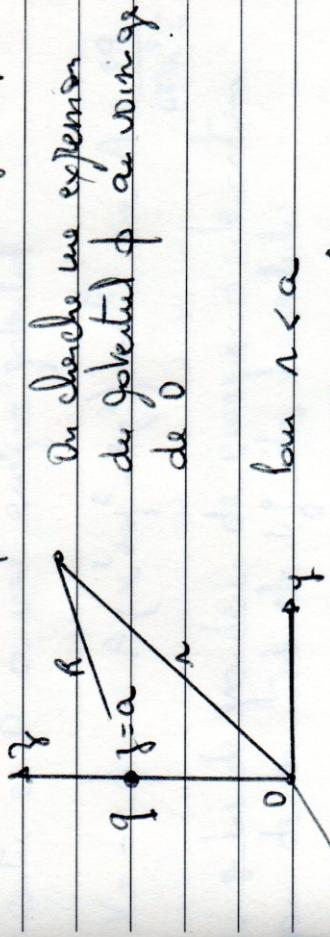
Résumé: On a  $B_{1/2}(x) = L(x)$  pour  $x$  assez

ou  $L(x) = \coth x - \frac{1}{x}$  : fil de longueur

## X champ cuitballin.

longueur ion ou un alone sr das un spide  
il faut tenir compte de l'infection, électrostatique  
de la distribution électrique de charge ave  
les charges environnantes das le circuit.  
et l'infection des charges en fallant  
le blocage des charges en surface et  
le déroulement de l'annostrophe d'un seul ion  
soit tous deux des un champ électrique du  
circuit.

1. potentiel électrique créé par une charge q ponctuelle



$$\text{pot}(\vec{r}) = \frac{q}{r} = \frac{q}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{q}{\sqrt{r^2 - a^2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left( \frac{1}{a} \right)^l P_l(\cos \theta) \quad (31)$$

avec  $P_l(\cos \theta)$  polynomes de Legendre.

$$P_0(\cos \theta) = 1 \quad P_1(\cos \theta) = \cos \theta \quad P_2(\cos \theta) = \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2}$$

## De maniere générale

$$P_e(u) = \frac{e^{k-1}}{k} u P_{e-1}(u) - \frac{k-1}{k} P_{e-2}(u) \quad (38)$$

pour  $|u| \leq 1$ .

Exercice : montrer que le champ  $\vec{q}$  fluide en  $y=a$  et  $\vec{y} = -a$  possède un potentiel au voisinage de 0 :

$$\vec{q}(a) = \frac{2q}{a} + \frac{iq}{a^3} b_2 (\cos \theta)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a}\right)$$

et qu'un  $\vec{v}$  au voisinage de 0 non fluide  
centré en 0 a une energie potentielle

$$V = -e\phi = A \left( u^2 + v^2 - 2\eta^2 \right) + \text{cst} \quad \text{avec } A = \frac{eq}{4\pi a^3 E}$$

2. ordre de grandeur de l'énergie d'interaction  
pour des ions 3d et 4f dans un solide.

La Hauteur d'un ion dans un solide à 4 bennes :

$$H = H_b + H_{\text{ff}} + H_{\text{HF}} + H_{\text{xc}} \quad (39)$$

$H_b$  prend en compte les interactions Coulombiennes entre les électrons, entre les électrons et les noyaux, qui

donnent naissance aux moments de spin libres  
des orbitales lokales  $T = \frac{1}{2}$  :  
les termes  $H_{3d}$ ,  $H_{4f}$  et  $H_{5f}$  sont les spin-orbites,  
le chargé contrôlant de la zénith.

**Table 4.8.** Typical magnitudes of energy terms (in K)  
for 3d and 4f ions in solids

	$\mathcal{H}_0$	$\mathcal{H}_{zz}$	$\mathcal{H}_{cf}$	$\mathcal{H}_z$
3d	$1-5 \times 10^4$	$10^2 - 10^3$	$10^4 - 10^5$	1
4f	$1-6 \times 10^5$	$1-5 \times 10^3$	$\approx 3 \times 10^2$	1

$\mathcal{H}_z$  is for 1 T

$H_{3d}$  est relativement faible dans la première couche pour la couche 4f est évidemment plus forte que la couche 4f et rencontrée par la couche 5f.

$H_{3d}$  peut être considéré comme  $H_{3d}$  dans la couche 4f calculé en perturbation pour prendre en compte le chargé contrôlant 4f et l'effet de la couche 5f. Il résulte donc une quantité positive et le résultat  $|J| = 1$  pour la couche 4f et le chargé contrôlant 4f et l'effet de la couche 5f. La couche 5f est utilisée comme une perturbation.

On se trouve face contre dans une situation où on a une couche 3d dans la couche 3d de Vane de plus à l'extérieur. Le chargé contrôlant 4f n'a pas d'effet sur  $H_z$  si  $J = 1$ .

Il faut donc considérer l' action du champ magnétique sur les électrons  $\mu_B \vec{B} = \frac{e}{m_e} \vec{v}_e \times \vec{B}$  de  $H_0$  avec de hautes énergies.

3. Modèle simplifié pour expliquer le blocage des moments magnétiques.

On considère dans un système hyperbolique du champ magnétique un seul élément unique dans un état  $f$ . Pour qu'il soit pur  $\in [-1, 1]$

les éléments sont

$$p_{n,\pm 1}(\bar{n}) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,\pm 1}(n) \sin \theta e^{i\phi}$$

$$p_{n,\pm 0}(\bar{n}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,\pm 1}(n) \cos \theta$$

$$p_{n,\pm 1}(\bar{n}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,\pm 1}(n) \sin \theta e^{-i\phi}$$

On suppose que l'ion  $p^+$  se trouve dans le cation donc le champ électrique orthogonal au champ magnétique

On suppose que

l'interaction de champ cristallin correspond au potentiel Coulombien, il s'écrit :

$$H_C = Ax^2 + By^2 - (A+B)\gamma^2 + Ct \quad \text{avec } A \neq B \quad (*)$$

et  $A > 0, B > 0 \quad (40)$

Exercice : montrer qu'il existe un unique  $\lambda$  tel que  $A\lambda = 0$

$$V(u, v, \lambda) = A u^2 + B v^2 - (A+B)\lambda^2 \text{ vérifie } AV=0$$

Exercice : montrer que  $[Wf, i] \neq 0$  si  $A \neq B$ .

par méthode de descente  $L_i = u \hat{f} y - v \hat{f} x$

$$\text{avec } f_x = \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{et } f_y = \frac{\partial}{\partial y}$$

et  $L_i = u \hat{f} y - v \hat{f} x$

$$x = \sin \theta \cos \varphi \quad Wf = A \sin^2 \theta (\cos \varphi)^2 + B \sin^2 \theta$$
$$y = \sin \theta \sin \varphi \quad - (A+B) \sin^2 \theta \cos \varphi$$

$$z = \cos \theta$$

$$[\hat{Wf}, i] = 0 \text{ si } Wf \neq f(\varphi)$$

$$\Rightarrow A = B$$

Si non alors  $A \neq B$   $[\hat{Wf}, i] \neq 0$

Donc la constante du second calcul est nulle. On vérifie que le contact des deux calculs est aussi obtenu du à la même quantité  $\lambda$  qui n'est pas nulle.

Pourtant ce n'est pas le seul effet de l'orbitale oblique lorsque  $\rho_{m,1,1} \neq 0$  mais de nombreux autres :

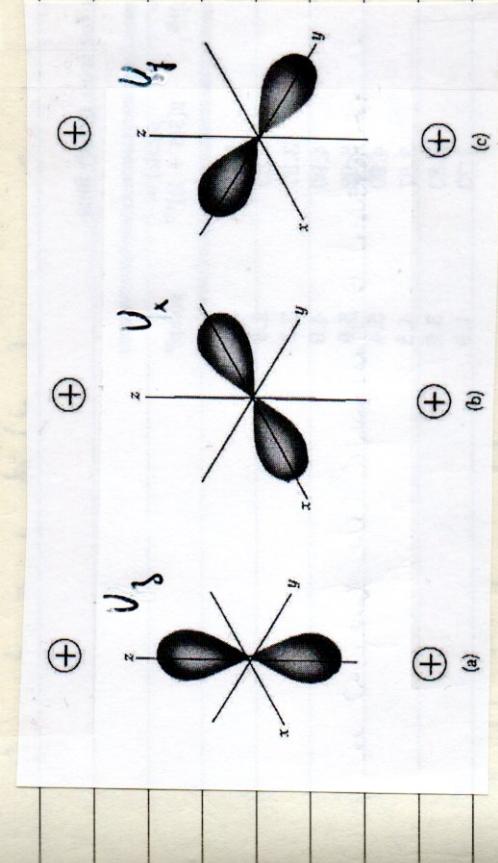
$$\rho_{m,1,0}(\bar{z}) = \int_{-\infty}^{\infty} k_{m,1,0}(a) \frac{z}{a} da$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_{m,1,1}(\bar{z}) - \rho_{m,1,-1}(\bar{z})) =$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} (\rho_{m,1,1}(\bar{z}) + \rho_{m,1,-1}(\bar{z})) =$$

$$\text{ou encore en notant } f(a) = \frac{k_{m,1}(a)}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{3}{4\pi} da$$

$$V_x = a f(a), \quad V_y = -f(a) \text{ et } V_z = 3 f(a) \text{ (ii)}$$



Réponse : densité électronique associée à  $V_2$ ,  $V_x$  et  $V_y$

Chaque orbite longue surface

$$L^2 U_{\frac{x}{y}} = \delta/(k+1) T^2 U_x \quad (42)$$

Exercice : simplifie le

le résultat (42) confirme que pour mon arbre schématique  
de facteurs d'ordre p (t=1)

Exercice : montrer que l'effet diagonal de la  
base  $U_x, U_y, U_z$  est donné par  $\int_0^\pi f(\theta) d\theta = \frac{16}{15}$

$$\langle U_x | U_y | U_z \rangle = \int f(a) (Ax^4 + Bx^2y^2 - (A+B)x^2z^2) dx.$$

car  $dx = \lambda' \sin \theta d\theta d\phi$  et  $x = \lambda \sin \theta \cos \phi$

$$y = \lambda \sin \theta \sin \phi$$

$$z = \lambda \cos \theta$$

$$\text{on a } I_1 = \int f(a) x^4 dx = \int f(a) \lambda'^4 \sin^4 \theta d\theta \int \cos^4 \theta d\phi \int_0^\pi$$

$$I_1 = \frac{16}{15} \pi \int_0^\pi f(a) \lambda'^4 d\theta > 0$$

$$\text{et } I_2 = \int f(a) x^2y^2 dx = \int f(a) \lambda'^2 \sin^2 \theta d\theta \int \cos^2 \theta \sin^2 \theta d\phi \int_0^\pi$$

$$I_2 = \frac{16}{60} \pi \int_0^\pi f(a) \lambda'^2 d\theta = I_1 / 4 \Rightarrow I_1 = 4 I_2$$

$$\text{Pour } \langle U_x | H_f | U_y \rangle = \alpha A \mathbb{I}_2 + \beta \mathbb{I}_2 - (\alpha + \beta) \mathbb{I}_2$$

$$= 3\alpha \mathbb{I}_2$$

de même

$$\langle U_y | H_f | U_y \rangle = 3\beta \mathbb{I}_2$$

$$\text{et } \langle U_z | H_f | U_z \rangle = -3(\alpha + \beta) \mathbb{I}_2$$

Vérifions que les vecteurs non diagonaux sont nuls.

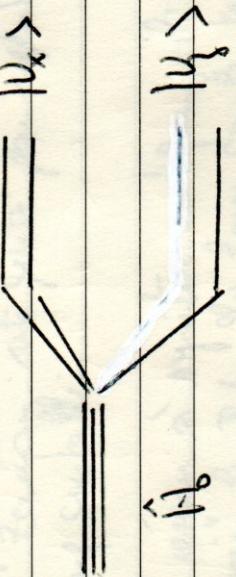
$$\langle U_x | H_f | U_y \rangle = \left( p^{\dagger} / \hbar \right) \left( \alpha x^3 y + \beta x y^3 - (\alpha + \beta) x y z^2 \right) \mathbb{I}_2$$

D'après la fonction impaire de  $x$  et  $y$   
donc

$$\langle U_x | H_f | U_y \rangle = 0$$

Exercice : vérifier que les autres termes non diagonaux sont nuls et utiliser la symétrie.

$$\langle U_x | H_f | U_y \rangle$$



$$\hat{H}_0$$

Résultat : les deux amplitudes des états hahn hybrides sont égales en direction des cotations.

Par continuation de la suite du moment orbital

seul  $Q_2$  est nul

$$\text{On reprend le dfj } L_1 = \frac{t}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\langle U_x | \hat{L}_1 | U_x \rangle = \langle U_y | \hat{L}_1 | U_y \rangle = \langle U_z | \hat{L}_1 | U_z \rangle = 0$$

On voit que une extinction (quenching) du moment orbital du ion au champ constant.

Chaque niveau a encore un moment orbital lancé que  $L^2$  et diagonal et donc  $\hat{J}^2 = 1$  mais la configuration spéciifique ne peut plus être conservée des moments.

On comprend "la configuration orbitale du krypton" qui paucifie elle aussi.

Le rôle du champ est de réduire les niveaux pour élever au départ dégénéré en des niveaux moins magnétiques après d'une énergie  $\Rightarrow \Psi_B$  (Zémane) l'énergie Zémane n'est pas rapport à celle du champ constant.

Das un moyen à moyenne au long que il y a nécessaire de "lancer" le D.L. plus loin car le temps d'radiation du paracétamol. En peu approximatif, on obtient p énergie

Dans certains cas, il n'est pas nécessaire non  
enfer de défaire pour affirmer à un  
un tiers c'est effectif. Tels : Teller. Il est  
Il est vrai avec des ions  $\text{M}^{+}$  et  $\text{Cl}^{-}$ .  
c'est faux avec des

Si l'hypothèse du bank : si hypothèse de égalité de spin  
le spin des atomes aux résultats de combinaison  
n'arrive pas :  $\left[ \begin{matrix} \hat{S}_x & \hat{S}_y \\ \hat{S}_z & \hat{S}_x \end{matrix} \right] = i\hbar E_{ij} \quad \text{et} \quad \left[ \begin{matrix} \hat{S}_x & \hat{S}_y \\ \hat{S}_z & \hat{S}_x \end{matrix} \right] = 0$  (43)  
où  $(i, j, k) \in \{x, y, z\}$  et  $E_{ij} = 1$  si  $(i, j)$  correspond  
à l'onde droite, et  $E_{ij} = -1$  sinon.

On peut écrire  $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x$  où  $\hat{\sigma}_x$  est l'opérateur de Pauli  
dans la direction générale représentées par des  
matrices  $2 \times 2$  sur le bas de l'égalité précédente de  $\hat{S}_x$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (44)$$

Exercice : vérifier que  $\left[ \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y \right] = 2i \hat{\sigma}_z$  et que  
 $\hat{\sigma}_z^2 = 1$

Soit  $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  et  $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  le état correspondant à  $\mu_1 = \frac{1}{2}$  et  $\mu_2 = -\frac{1}{2}$ , on a les relations :

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z \alpha &= \alpha \\ \hat{\sigma}_x \alpha &= \beta \\ \hat{\sigma}_y \alpha &= i\beta\end{aligned}\quad (45)$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z \beta &= -\beta \\ \hat{\sigma}_x \beta &= -\alpha \\ \hat{\sigma}_y \beta &= -i\alpha\end{aligned}$$

Considérons 2 particules A et B, de spins  $\frac{1}{2}$  et  $\frac{1}{2}$ , le état du spin total  $\hat{\sigma}^z = \hat{\sigma}_A^z + \hat{\sigma}_B^z$  ne contenant à priori de combinaisons :

l'unique à priori

$$\begin{aligned}\alpha(1,1) &= \alpha(1) \alpha(1) & \beta(1,1) &= \beta(1) \beta(1) \\ \alpha'(1,1) &= \alpha(1) \beta(1) & \beta'(1,1) &= \beta(1) \alpha(1)\end{aligned}$$

Or l'échange de particules, ce état a été écrit de deux façons que  $c' \rightarrow d'$  et  $d' \rightarrow c'$ . On peut poser la combinaison :

$$\begin{aligned}c(1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1) \beta(1) + \beta(1) \alpha(1)) \text{ et} \\ d(1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1) \beta(1) - \beta(1) \alpha(1)) \text{ à}\end{aligned}$$

partir de  $c'$  et  $d'$ .

$c$  est hypothétique en échange des particules et  $d$  est anti-hypothétique.

On vérifie que

$$[\hat{f}_3(1) + \hat{f}_1(1)] a(1,1) = \hat{f}_3(1) a(1) a(1,1) + a(1) \hat{f}_1(1) a(1,1)$$

$$= 1 \quad a(1) a(1) + 1 \quad a(1) a(1) = 2 \quad a(1,1)$$

$$\sum_3 a(1,1) = \frac{1}{2} [\hat{f}_3(1) + \hat{f}_1(1)] a(1,1) = \frac{1}{2} a(1,1)$$

$$= a_{13} + a(1,1) \Rightarrow a_{13} = 1$$

$$[\hat{f}_3(1) + \hat{f}_1(1)] b(1,1) = -2 \quad b(1,1) \Rightarrow a_{13} = -1$$

$$[ \quad ] c(1,1) = 0 \Rightarrow a_{13} = 0$$

$$[ \quad ] d(1,1) = 0 \Rightarrow a_{13} = 0$$

$$\text{D'autre part: } \sum_1^2 = \sum_1^2 + \sum_2^2 + 2 \sum_1 \cdot \sum_2$$

$$S^2 = 2 \times \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}+1\right) t_0^2 + 2 \times \frac{1}{2} \left[ \hat{f}_3(1) \hat{f}_x(1) + \hat{f}_1(1) \hat{f}_y(1) + \hat{f}_1(1) \hat{f}_y(1) \right]$$

de même que

$$\sum_1^2 \begin{vmatrix} a(1,1) \\ b(1,1) \\ c(1,1) \end{vmatrix} = 2 \frac{1}{2} \begin{vmatrix} a(1,1) \\ b(1,1) \\ c(1,1) \end{vmatrix} = S \begin{pmatrix} S+1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{cases} a(1,1) \\ b(1,1) \\ c(1,1) \end{cases}$$

$$\Rightarrow S = 1$$

$$\text{Vorwärts für } S=0 \quad d(1,2) = 0 \quad d(1,1) = S(1,1) \hbar^2 \quad d(1,1)$$

Geht Hypothese der Spin  $a, b, c$  entspricht  
dann aus 3 ist der Winkel zwischen  $a$  und  $b$  spin  
Total  $S=1$  also zwei Elektronenspin  $d(1,1)$   
in einem Winkel  $\alpha$  zu  $S=0$ .

$$S=1$$

$$S=0$$

$$\alpha(1) \alpha(2)$$

$$\mu_3 = 1$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1) \beta(2) + \beta(1) \alpha(2)) \quad \mu_3 = 0 \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1) \beta(1) + \beta(1) \alpha(1)) \quad \text{oder } \mu_3 = 0$$

$$\beta(1) \beta(2) \quad \mu_3 = -1$$

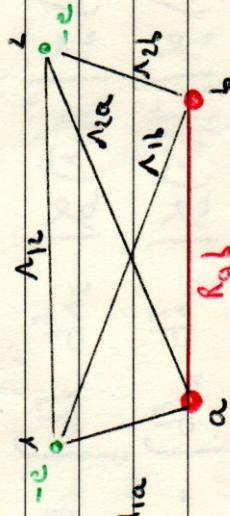
Kripel eines der Spins kann jeder austauschen.

$$(16)$$



## VII Interaction d'échange.

On considère une molécule d'hydrogène combiné de 2 atomes a et b à la distance  $R_{ab}$  des 2 électrons molé, 1 et 2.



Le Hamiltonien du système à 2 électrons s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) + V(\bar{\pi}_1, \bar{\pi}_2) \\ &= \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) + V(\bar{\pi}_2, \bar{\pi}_1) \end{aligned} \quad (\text{h1})$$

Valeur constante en

$$\hat{H}_a(1) = \frac{1}{2\mu_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ab}}$$

et le Hamiltonien d'un atome isolé avec un e-

$$V(\bar{\pi}_x, \bar{\pi}_z) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{R_{1a}} - \frac{1}{R_{1b}} \right) \quad (\text{h2})$$

d'où l'interaction combinatoire est égale au moyen entre les deux atomes la somme de l'énergie fondamentale d'énergie pour l'atome isolé vérifié :  $\hat{H}_{\text{tot}} \rho_a = e \rho_a^2$  (h3)

On définit les valeurs de recouvrement :

$$R = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2)|^2 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (50)$$

et de combinaison

$$\begin{aligned} U &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\psi_a(\vec{r}_1)|^2 |\psi_b(\vec{r}_2)|^2 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\psi_a(\vec{r}_1)|^2 |\psi_b^*(\vec{r}_1)|^2 V(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \end{aligned} \quad (51)$$

et d'échange :

$$\begin{aligned} A &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \\ &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_1) V(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (52)$$

On cherche des équations propres approchées pour la matrice des forces de couplage entre atomes. L'interaction dépend alors que les équations sont liées entre elles. On trouve une équation pour l'énergie de couplage qui n'est pas complètement couplée. Les deux atomes sont couplés entre eux et il y a un couple.

On se limite aux combinaisons suivantes de la forme :  
où  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  sont les deux atomes.

la fonction d'onde totale  $\psi_{1,2}^{(1)} (\text{spins})$

et antisymétrique dans l'échange des deux  
électrons la principe de Pauli.  
On obtient en formant la décomposition de Röt.

$$\psi_{1,2} = \begin{vmatrix} \lambda_a(1) & \alpha(1) & \lambda_b(1) & \alpha(1) \\ \lambda_a(2) & \alpha(1) & \lambda_b(2) & \alpha(1) \end{vmatrix} \quad (53)$$

$$\psi_{1,2}^{(1)} = \begin{vmatrix} \lambda_a(1) & \beta(1) & \lambda_b(1) & \beta(1) \\ \lambda_a(2) & \beta(1) & \lambda_b(2) & \beta(1) \end{vmatrix} \quad (53)$$

$$\psi_{1,2}^{(2)} = \begin{vmatrix} \lambda_a(1) & \alpha(1) & \lambda_b(1) & \beta(1) \\ \lambda_a(2) & \alpha(1) & \lambda_b(2) & \beta(1) \end{vmatrix}$$

En décomposant son a :

$$\psi_{1,2}^{(1)} = \left( \lambda_a(1) \lambda_b(2) - \lambda_b(1) \lambda_a(2) \right) \alpha(1) \alpha(2)$$

$$\psi_{1,2}^{(2)} = \left( \lambda_a(1) \lambda_b(2) - \lambda_b(1) \lambda_a(2) \right) \beta(1) \beta(2)$$

qui sont antisymétriques et n'ont pas de spin.

et

$$\chi'_3(1,1) = \lambda_a(1)\lambda_b(1)\alpha(1)\beta(1) - \lambda_b(1)\lambda_a(1)\beta(1)\alpha(1)$$

$$\chi'_4(1,1) = \lambda_a(1)\lambda_b(1)\beta(1)\alpha(1) - \lambda_b(1)\lambda_a(1)\alpha(1)\beta(1)$$

Qui ne se找不到ent pas  
lors travailler avec la échelle propre des spin totale,  
on trouve les combinaisons

$$\begin{aligned}\chi'_3(1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi'_1 + \chi'_4 \right) = \left( \lambda_a(1)\lambda_b(1) - \lambda_b(1)\lambda_a(1) \right) \times \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(1) + \beta(1)\alpha(1))\end{aligned}$$

On trouve en effet une échelle propre en spin totale.

$$\begin{aligned}\chi'_4(1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi'_1 - \chi'_4 \right) = \left( \lambda_a(1)\lambda_b(1) + \lambda_b(1)\lambda_a(1) \right) \times \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(1) - \beta(1)\alpha(1))\end{aligned}\quad (54)$$

Symétrie et anti-symétrie en spin.  
 Ces combinaisons peuvent être classées suivant la valeur  
propre de  $S$  et  $\hat{S}$

$$S=0 \quad S=1$$

$$\chi'_3(1,1) \quad \mu_{S=1}$$

$$\chi'_c(1,1) \quad \mu_S=0$$

$$\chi'_3(1,1) \quad \mu_S=-1$$

$$\chi'_4(1,1) \quad \mu_S=0$$

Antiparallèle deux spin  
un seul anti-parallèle deux spin

Comme l'Hamitonien (41) est indépendant du spin, on cherche la valeur effective de valeur propre de  $\hat{H}$  en se considérant que la partie matricielle de Hamiltonien d'encore à 2 particules. Soit l'échel ancré au temps considéré au temps t:

$$\mathcal{H} = \gamma_a(1)\hat{\gamma}_b(1) - \gamma_b(1)\hat{\gamma}_a(1) = \frac{\gamma_a}{2} - \frac{\gamma_b}{2} \quad (55)$$

Sous l'échel hypothétique correspondant au temps t

$$\mathcal{H}_t = \gamma_a(1)\hat{\gamma}_b(1) + \gamma_b(1)\hat{\gamma}_a(1) = \frac{\gamma_a}{2} + \frac{\gamma_b}{2} \quad (56)$$

Exercice : en utilisant les formules d'encore (55) et (56), calculer les valeurs moyennes  $E_{\pm}$  de  $\hat{H}$  demandé aux valeurs propres de l'énergie pour l'échel fondamental et le premier état excité de la molécule d'Hydrogène.

Indication : calculer les éléments matriciels de  $V, \hat{H}_a, \hat{H}_b$ , sous la forme approfondie pour  $\frac{\gamma_a}{2} \neq \frac{\gamma_b}{2}$

Solution :

$$\langle \frac{\gamma_a}{2} | \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) | \frac{\gamma_a}{2} \rangle = \langle \frac{\gamma_a}{2} | \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) | \frac{\gamma_b}{2} \rangle = 2 \epsilon$$

$$\langle \frac{\gamma_a}{2} | \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) | \frac{\gamma_b}{2} \rangle = \langle \frac{\gamma_b}{2} | \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) | \frac{\gamma_a}{2} \rangle = 2 \epsilon | \kappa |^2$$

bien le générateur d'interaction condensatrice, on a

$$\langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle = \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle = U$$

$$\langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle = \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle = A$$

d'autre part :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle &= \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle + \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \\ &= 2(1 \pm |R|^2) \end{aligned} \quad (57)$$

d'où le tableau moyenne de  $\hat{H}$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \hat{H} | \psi_{\pm} \rangle &= E_{\pm} \langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle = 2(1 \pm |R|^2) E_{\pm} \\ &= \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \hat{H}_{\alpha}(z) + \hat{H}_{\beta}(z) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle + \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \\ &\quad + \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \hat{H}_{\alpha}(z) + \hat{H}_{\beta}(z) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle + \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \\ &\quad \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \hat{H}_{\alpha}(z) + \hat{H}_{\beta}(z) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \\ &\quad \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | \hat{H}_{\alpha}(z) + \hat{H}_{\beta}(z) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \pm \langle \psi_{\frac{1}{2}} | V(\bar{n}_1, \bar{n}_2) | \psi_{\frac{1}{2}} \rangle \\ &= 4E + 2U \pm 4|c|R^2 \pm 2A \end{aligned} \quad (58)$$

On en déduit :

$$E_{\pm} = \frac{2e}{1 \pm |k|^2} (1 \pm |k|^2) + U \mp A = 2e + \frac{U \pm A}{1 \pm |k|^2}$$

$$E_{\pm} = 2e + \frac{U - A|k|^2}{1 - |k|^4} \pm \frac{A - U|k|^2}{1 - |k|^4} \quad (51)$$

En élément de volume de  $A$  et  $V$  par la méthode du Monte-Carlo on montre que le démin. veille et négatif. L'élt. fondamental correspond donc à  $\frac{k}{k_0}$  et est donc l'élt. singulier ( $S=0$ ).  
Il repêche des triplets par une énergie :

$$\Delta E = E_- - E_+ = -2 \frac{A - U|k|^2}{1 - |k|^4} > 0 \quad (60)$$

Ce démin. éltal., qui n'est bien séparé des autres éltas-excités, peuvent être décris par un Hamiltonien effectif associé aux états de spins, l'hamiltonien de Heisenberg

$$\hat{H}_{Heisenberg} = -J_H \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + cte \quad (61)$$

où  $J_H$  est l'influence d'échange entre les spins des électrons 1 et 2.

l'on identifie  $J_{12}$ , paire appartenant à ceux des opérateurs de spin :

$$\hat{S}^z = \left( \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2 \right)^z = \hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z + 2 \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

$$\text{d'où avec des spins } 1/2 : \quad \hat{S}_1^z \cdot \hat{S}_2^z = \frac{\hbar^2}{2} - \frac{3}{4} \hbar^2 \cdot 1$$

Da l'éch. Tz fait  $\langle \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z | \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z \rangle = S(S+1) \hbar^2 = 2\hbar^2$   
daus que das z'ektr. singlet  $\langle \hat{S}_1^z \cdot \hat{S}_2^z | \hat{S}_1^z \cdot \hat{S}_2^z \rangle = 0$

On a donc  $E_- = -J_{12} \left( \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right) + c\hbar = -\frac{J_{12}}{4} \hbar^2 + c\hbar$   
daus z'ektr. singlet  
Or  $E_+ = \frac{3}{4} J_{12} \hbar^2 + c\hbar$  dans z'ektr. singlet.  
Donc

$$\Delta E = -J_{12} \hbar^2 = -2 \frac{A - U|R|^2}{1 - 1/\kappa^4}$$

$$\text{Final result } \quad \overline{J_{12}} = \frac{2}{\kappa^2} \frac{A - U|R|^2}{1 - 1/\kappa^4}$$

$$\frac{U_-}{U_+} = \frac{-2 \frac{A - U|R|^2}{1 - 1/\kappa^4}}{\frac{-J_{12} \hbar^2}{1 - 1/\kappa^4}} \quad \overline{S=1}$$

l'interaction d'échange  $J_{12}$  est entre  $S_1$  et  $S_2$  n'est

qu'une interaction effectuée résultant de  
l'interaction d'échange et de Coulomb entre é-

lectrons dans un état fondamental  
de molécule He se peut faire de manière asymptotique.