TD 4: Spin et moment magnétique en mécanique quantique

1 Moment magnétique en mécanique classique

En mécanique classique, il n'existe qu'une seule source pour le magnétisme : les courants de charges électriques. Comme il n'existe pas (sauf preuve du contraire) de monopôles magnétiques, la manifestation la plus courante du magnétisme est la présence d'un moment dipolaire non-nul.

1. On considère un électron (classique) décrivant une orbite circulaire autour du noyau. Calculer son moment cinétique $\vec{L}$ et son moment magnétique $\vec{\mu}$. Établir un lien entre ces deux quantités.
2. Quelle est l'équation d'évolution du moment magnétique $\vec{\mu}$ en présence d'un champ magnétique ? La résoudre dans un champ $\vec{B} = B\,\vec{\mathrm{e}_z}$ constant. Déterminer l'évolution des composantes μ_x et μ_y au cours du temps.
3. Que se passe-t-il si on place un moment magnétique rigide dans un champ $\vec{B}$ statique mais non uniforme ?
4. **Bonus.** Généraliser le résultat de la question 1 en déterminant un lien général entre le moment magnétique et moment cinétique orbital d'un système classique de particules chargées toutes identiques. Le moment magnétique d'une distribution de courant $\vec{\jmath}$ s'écrit

$$\vec{\mathcal{M}} = \frac{1}{2}\iiint \vec{r} \wedge \vec{\jmath}\;\mathrm{d}V. \tag{1}$$

En mécanique classique, un moment cinétique engendre un moment magnétique. Il s'agit d'un moment ***orbital****, qui a un équivalent direct en mécanique quantique : l'opérateur $\vec{L}$ associé aux nombres quantiques (ℓ, m) pour l'atome d'hydrogène. Néanmoins, il existe d'autres moments cinétiques en mécanique quantique, qui n'ont* ***aucun équivalent*** *en mécanique classique. Il s'agit du* spin*, moment cinétique intrinsèque à chaque particule élémentaire, propriété fondamentale de la particule comme sa masse, sa charge, sa couleur (quark), etc.*

2 Moment cinétique propre ou *spin* 1/2

Comme le montre l'expérience de Stern et Gerlach, l'électron possède un moment cinétique intrinsèque, qu'on appelle *spin*. Projeté selon un axe quelconque, il peut prendre seulement deux valeurs : $\pm\hbar/2$. Toutes les particules élémentaires possèdent un spin, entier ou demi-entier. L'axe de quantification étant arbitraire, on choisit généralement l'axe du champ magnétique lorsqu'il est présent (ou un axe de symétrie du système à défaut). Le spin est une observable physique, et l'opérateur associé en mécanique quantique est noté $\hat{S}$. On a vu un lien entre moment cinétique et magnétique en mécanique classique. Celui-ci existe toujours en mécanique quantique (sous une forme généralisée), et également pour les moments intrinsèques.

1. Soient $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les états quantiques associés à ces deux valeurs. Ils forment une base e de l'espace des vecteurs d'onde. Écrire la matrice $\mathrm{Mat}_e\hat{S}_z$ représentant l'opérateur $\hat{S}_z$, projection du moment cinétique dans la base des états $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. [1]

On admet que les projections $\hat{S}_x$ et $\hat{S}_y$ sont représentées dans cette même base par les matrices :

$$\mathrm{Mat}_e\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad \mathrm{Mat}_e\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}. \tag{2}$$

1. La projection $\hat{S}_u$ du moment cinétique dans la direction du vecteur unitaire $\vec{u}$ est représentée par la matrice (S_u) issue du produit scalaire

$$\mathrm{Mat}_e\hat{S}_u = \begin{pmatrix}\mathrm{Mat}_e\hat{S}_x\\ \mathrm{Mat}_e\hat{S}_y\\ \mathrm{Mat}_e\hat{S}_z\end{pmatrix}\cdot\vec{u}. \tag{3}$$

1. En mécanique quantique, il faut faire la différence entre l'opérateur linéaire, sa représentation dans une base donnée et ses valeurs propres. Dans les ouvrages, ces différentes notions sont souvent confondues. Par souci de pédagogie, on les notera respectivement $\hat{O}$, $\mathrm{Mat}_e\hat{O}$ et O.

Exprimer la matrice $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_u$ en utilisant les coordonnées sphériques pour repérer le vecteur $\overrightarrow{u}$ dans l'espace.

2. Déterminer les valeurs propres de (S_u). Expliquer comment déterminer les états propres associés. On admettra qu'ils peuvent s'écrire

$$\begin{cases} |+_u\rangle = \mathrm{e}^{-i\varphi/2} \cos\frac{\theta}{2} |+\rangle + \mathrm{e}^{i\varphi/2} \sin\frac{\theta}{2} |-\rangle \\ |-_u\rangle = -\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2} \sin\frac{\theta}{2} |+\rangle + \mathrm{e}^{i\varphi/2} \cos\frac{\theta}{2} |-\rangle\,. \end{cases} \tag{4}$$

Justifier l'emploi de la notation $|+_u\rangle$ et $|-_u\rangle$.

3. Si un électron est préparé dans l'état $|+_u\rangle$ et qu'on mesure son moment cinétique selon l'axe Oz, quelle est la probabilité de le mesurer dans l'état $|+\rangle$? dans $|-\rangle$?

3 Moment dans un champ magnétique et précession de Larmor

Comme en mécanique classique, le moment magnétique engendré par un moment cinétique lui est colinéaire, qu'il soit orbital ou intrinsèque. Cependant, le facteur de proportionnalité n'est plus nécessairement γ. On le notera $g\gamma$, avec g un nombre sans dimension appelé *facteur de Landé*. Pour l'électron libre, on a par exemple $g_L = 1$ et $g_S \approx 2$ pour les moments orbital et intrinsèque respectivement.

On place un électron initialement préparé dans l'état $|+_u\rangle$ dans un champ magnétique $\overrightarrow{B} = B\,\overrightarrow{e_z}$.

1. À l'aide de l'expression classique de l'énergie d'un moment magnétique, déduire l'expression du hamiltonien du problème. On fera apparaître le rapport gyromagnétique de l'électron, et on introduira la pulsation cyclotron $\omega_0 = \frac{eB}{m}$.

2. En déduire l'équation d'évolution temporelle du système. L'état du système est initialement $|\psi(t=0)\rangle = |+_u\rangle$. Exprimer le ket $|\psi(t)\rangle$ du système à tout instant t dans la base $\{|+\rangle\,, |-\rangle\}$. Montrer qu'il peut se mettre sous la forme $\left|+_{u(t)}\right\rangle$, et interpréter.

3. Déterminer les valeurs moyennes $\langle S_z\rangle$ et $\langle S_x\rangle$, ainsi que les probabilités de trouver le système dans l'état $|+\rangle$ ou $|+_x\rangle$ à un instant t.

4 Du quantique au classique

Les résultats des deux parties précédentes sont étonnement semblables, malgré deux théories totalement différentes. Montrons que ce résultat n'est pas accidentel.

1. Rappeler la définition quantique d'une valeur moyenne : $\left\langle \hat{A} \right\rangle$ d'une observable A, ainsi que le théorème d'Ehrenfest.

2. Montrer que l'équation d'évolution de $\langle\overrightarrow{\mu}\rangle(t)$ s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}\langle\overrightarrow{\mu}\rangle}{\mathrm{d}t} = g\gamma\,\langle\overrightarrow{\mu}\rangle \wedge \overrightarrow{B}. \tag{5}$$

On utilisera que le commutateur $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ et de même pour toute permutation directe des indices.

La moyenne de l'opérateur moment magnétique suit la même équation (à un facteur g près !) que le moment magnétique classique, et ce quelle que soit la dépendance en temps du champ magnétique. Ce résultat explique la similarité de résultats entre mécanique classique et quantique.

5 Extrait de C2008 : Anisotropie magnétique

Une molécule de Fe_8 a un macro-spin $s = 10$. Lorsqu'elle cristallise, il peut apparaître des axes privilégiés de facile aimantation et donc une anisotropie magnétique pour le cristal. Le hamiltonien peut s'écrire

$$\hat{H} = -\frac{D}{\hbar^2}\hat{S}_z^2 - g\gamma B\hat{S}_z + \frac{K}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2). \tag{6}$$

où D est une constante positive. Le terme $\hat{W} = \frac{K}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2)$ est considéré comme une perturbation d'un hamiltonien $\hat{H}_0 = -\frac{D}{\hbar^2}\hat{S}_z^2 - g\gamma B\hat{S}_z$.

On note $|m\rangle$ les états propres de $\hat{S}_z$, vérifiant $\hat{S}_z\,|m\rangle = \hbar m\,|m\rangle$.

1. Pour $K = 0$, calculer les valeurs propres $E_0(m)$ du hamiltonien $\hat{H}_0$, en fonction de m le nombre quantique magnétique. Représenter graphiquement $E_0(m)$ pour $B = 0$ et $B \neq 0$. On se place à $B = 0$. Quelle est la valeur en énergie de la barrière d'anisotropie que doit passer un état de spin $S = \pm 10$ pour inverser son spin ? En écrivant que cette énergie correspond à $k_\mathrm{B} T_c$, determiner la température T_c en-dessous de laquelle il ne sera plus possible pour une molécule d'être thermiquement activée pour passer la barrière. Pour l'application numérique, on prendra $D = 0{,}275 k_\mathrm{B}$.
2. Tracer maintenant les énergies $E_0(m)$ en fonction du champ magnétique B. Déterminer les valeurs de B pour lesquelles les énergies des états $m > 0$ et $m' < 0$ se croisent.
3. On choisit deux m et m', et on se place à un champ B tel que $E_0(m) = E_0(m')$. Si $K \neq 0$, justifier que les $|m\rangle$ ne sont plus des états propres de $\hat{H}$. Pour deux états $|m\rangle$ et $|m'\rangle$, on suppose que $\hat{W}$ est représenté par la matrice

$$\mathrm{Mat}_e \hat{W} = \begin{pmatrix} \delta & \beta \\ \beta & \delta \end{pmatrix}. \tag{7}$$

   On cherche des états propres du problème sous la forme $|\psi\rangle = x\,|m\rangle + y\,|m'\rangle$. Trouver le système d'équations vérifié par x et y. *Dans le prochain TD, on déterminera les valeurs propres d'un système à deux niveaux de façon générale, ce qui s'appliquera en particulier à cet exercice.*