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.

> **Correction**
>
> Pour une orbite circulaire orthogonale à (Oz), le moment cinétique de l'électron vaut $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = mr\vec{e_r} \wedge v\vec{e_\theta} = mrv\,\vec{e_z}$. Quant au moment magnétique, il se calcule en exprimant le courant créé par un électron sur une orbite circulaire :
>
> $$\vec{\mu} = iS\vec{e_z} = \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}\pi r^2\,\vec{e_z} = \frac{-e}{T}\pi r^2\,\vec{e_z} = \frac{-ev}{2\pi r}\pi r^2\,\vec{e_z} = \frac{-e}{2m}mrv\,\vec{e_z}.$$
>
> Ainsi, les deux moments sont colinéaires : $\vec{\mu} = \gamma\vec{L}$ avec $\boxed{\gamma = \frac{-e}{2m}}$ le *rapport gyromagnétique* de l'électron.

2. Quelle est l'équation d'évolution du moment magnétique $\vec{\mu}$ en présence d'un champ magnétique ? La résoudre dans un champ $\vec{B} = B\,\vec{e_z}$ constant. Déterminer l'évolution des composantes μ_x et μ_y au cours du temps.

> **Correction**
>
> Le TMC s'écrit
>
> $$\frac{\mathrm{d}\vec{L}}{\mathrm{d}t} = \vec{\mu} \wedge \vec{B} \qquad \text{d'où} \qquad \frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t} = \gamma\vec{\mu} \wedge \vec{B}.$$
>
> Par composantes, on obtient une équation montrant que $L_z = \mathrm{cste}$, et deux équations couplées, qui se résolvent en posant par exemple $z = \mu_x + i\mu_y$:
>
> $$\begin{cases} \dot{\mu}_x = \gamma B \mu_y \\ \dot{\mu}_y = -\gamma B \mu_x \end{cases} \qquad \Longrightarrow \qquad \dot{z} = -i\gamma B z.$$
>
> Équation d'ordre 1 qui se résout en $z(t) = \underline{z}_0\,\mathrm{e}^{-i\gamma B t}$. En supposant qu'à l'instant initial, le moment est aligné à (Ox) : $\mu_x(t) = \mu\cos(2\pi f t)$ et $\mu_y(t) = \mu\sin(2\pi f t)$, avec $f = \gamma/2\pi$ la fréquence de précession du moment.
>
> **Contrairement à un moment dipolaire électrique, le moment ne s'aligne jamais avec le champ magnétique**. Cet alignement se produit uniquement grâce à un couplage extérieur (interaction avec des phonons du cristal ou de la molécule), ce qui est central dans le fonctionnement d'un appareil d'IRM. En effet, l'existence d'une énergie potentielle $\mathrm{Ep} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ montre que des échanges d'énergie avec l'environnement permettrait de minimiser Ep.

3. Que se passe-t-il si on place un moment magnétique rigide dans un champ $\vec{B}$ statique mais non uniforme ?

Correction

On se rappelle de l'expression de la force qui s'applique sur un dipôle pour un champ non uniforme : $\overrightarrow{F} = \overrightarrow{\text{grad}}\,(\overrightarrow{\mu} \cdot \overrightarrow{B})$. Le moment magnétique dérive vers les champs forts.

Remarque : On peut montrer que la force dérive d'une énergie potentielle, grâce à la formule d'analyse vectorielle de $\overrightarrow{\text{grad}}\,(\overrightarrow{a} \cdot \overrightarrow{b})$. Celle-ci donne un résultat différent si le moment magnétique est permanent (indépendant du champ magnétique) ou induit par le champ magnétique. On a :

$$\text{Ep} = -\overrightarrow{\mu} \cdot \overrightarrow{B} \qquad \text{(dipôle permanent)} \qquad \text{Ep} = -\frac{1}{2}\overrightarrow{\mu} \cdot \overrightarrow{B} \qquad \text{(dipôle induit)}$$

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 $\overrightarrow{\jmath}$ s'écrit

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

Correction

$$\overrightarrow{\mathcal{M}} = \frac{1}{2}\iiint \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{(\rho\overrightarrow{v})}\,\mathrm{d}V = \frac{\rho}{2\mu}\iiint \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{v}\,\mu\mathrm{d}V = \frac{Q}{2M}\overrightarrow{L}.$$

où on a utilisé : $\rho = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}V} = \mu\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}M}$, cette dérivée $\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}M}$ étant constante et égale à Q/M puisque la masse et la charge d'une particule sont fixées.

*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 $\overrightarrow{L}$ 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]

Correction

Les valeurs propres de l'opérateur étant les valeurs physiquement observables, on connaît l'action de l'opérateur sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$: $S_z|+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|+\rangle$ et $S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle$. La matrice de cet opérateur s'écrit donc :

$$\mathrm{Mat}_e\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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.

puisqu'on rappelle que dans une base de vecteurs (e_j), la j^{e} colonne de la matrice d'une application linéaire u est donnée par $u(e_j)$.

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

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

2. 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

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

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

Correction

En coordonnées sphériques (r, θ, φ), le vecteur unitaire $\vec{u}$ a pour composantes dans la base $(\vec{e_x}, \vec{e_y}, \vec{e_z})$: $\vec{u} = (\cos\varphi \sin\theta, \sin\varphi \sin\theta, \cos\theta)$. Ainsi, le produit scalaire de l'énoncé donne :

$$\begin{aligned} \mathrm{Mat}_e \hat{S}_u &= \cos\varphi \sin\theta \Big(\mathrm{Mat}_e \hat{S}_x\Big) + \sin\varphi \sin\theta \Big(\mathrm{Mat}_e \hat{S}_y\Big) + \cos\theta \Big(\mathrm{Mat}_e \hat{S}_z\Big) \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & (\cos\varphi - i\sin\varphi)\sin\theta \\ (\cos\varphi + i\sin\varphi)\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{-i\varphi}\sin\theta \\ \mathrm{e}^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

3. Déterminer les valeurs propres de $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_u$. Expliquer comment déterminer les états propres associés. On admettra qu'ils peuvent s'écrire

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

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

Correction

Comme les matrices $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_x, \mathrm{Mat}_e \hat{S}_y$ et $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_z$, $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_u$ est une matrice de symétrie (au facteur $\hbar/2$ près). Ses valeurs propres sont donc ± 1 (au facteur $\hbar/2$ près). On peut le vérifier en calculant les racines λ de son polynôme caractéristique $P = \det(X\mathbb{1} - \mathrm{Mat}_e \hat{S}_z) = X^2 - \mathrm{Tr}\mathrm{Mat}_e \hat{S}_z X + \det\mathrm{Mat}_e \hat{S}_z$. En effet :

$$P(\lambda) = 0 = \lambda^2 - 0 - \frac{\hbar^2}{4}(\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4}.$$

et on retrouve $\lambda = \pm\hbar/2$.

Pour déterminer des vecteurs propres X d'une matrice M, il faut résoudre l'équation matricielle $MX = \lambda X$, soit un système de deux équations. Pour les $\lambda = \pm\hbar/2$, les deux équations sont redondantes, on détermine donc l'une des composante de X en fonction de l'autre. Il reste un facteur de proportionnalité qui est partiellement déterminé par la normalisation. Reste un facteur de phase pris de façon arbitraire (donc souvent $\mathrm{e}^{i0} = 1$, mais c'est un choix).

Les vecteurs $|\pm_u\rangle$ étant des vecteurs propres, ils vérifient $\mathrm{Mat}_e \hat{S}_u\,|\pm_u\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\,|\pm_u\rangle$. Donc l'équivalent classique serait de dire que « le spin est orienté dans la direction donnée par le vecteur $\vec{u}$ ».

4. 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 $|-\rangle$?

Correction

De façon générale, la probabilité d'obtenir une valeur λ pour une observable est donnée par le module carré du produit scalaire entre l'état dans lequel est le système et l'état propre associé à cette valeur propre. En l'occurrence, la probabilité p_+ de mesurer l'état dans $|+\rangle$ est

$$p_+ = |\langle +|+_u\rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}.$$

De façon similaire $p_- = \sin^2\frac{\theta}{2}$. On vérifie que $p_+ + p_- = 1$ puisqu'il n'y a que deux états possibles dans lesquels l'état peut se projeter.

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 au repos initialement préparé dans l'état $|+_u\rangle$ dans un champ magnétique $\vec{B} = B\,\vec{e_z}$. On ne considère ici que le moment cinétique de spin. De plus, on ne considère pas la dynamique de l'électron.

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 $\omega_0 = \frac{eB}{m}$.

Correction

En électromagnétisme classique, on a $E_\mathrm{p} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. On peut imaginer l'expression du hamiltonien pour un moment magnétique de spin : $\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$, avec $\hat{\vec{\mu}}$ l'opérateur de moment magnétique donné par $\hat{\vec{\mu}} = g\gamma\hat{\vec{S}}$. On ne s'intéresse qu'au spin dans cet exercice, pas à un éventuel autre moment cinétique. Ainsi puisque $\vec{B} = B\,\vec{e_z}$,

$$\hat{H} = -g\gamma\hat{S}_z B.$$

Le facteur gyromagnétique de l'électron est proche de 2, la valeur prédite par l'équation de Dirac en mécanique quantique relativiste (des corrections arrivent avec l'électrodynamique quantique). On prendra $g = 2$ dans la suite. Alors :

$$\hat{H} = -2\frac{-e}{2m}\hat{S}_z B = \omega_0\hat{S}_z.$$

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 $|+_{u(t)}\rangle$, et interpréter.

Correction

L'équation de Schrödinger régit l'évolution temporelle du ket : $i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}|\psi\rangle$. Dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, $\hat{S}_z$ est diagonal, ce qui va faciliter la résolution. Décomposons $|\psi\rangle(t) = a(t)|+\rangle + b(t)|-\rangle$. On a :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \quad\Longrightarrow\quad \left\{\begin{array}{l}\dot{a} = -i\frac{\omega_0}{2}a\\ \dot{b} = i\frac{\omega_0}{2}b\end{array}\right. \quad\Longrightarrow\quad \left\{\begin{array}{l}a(t) = a_0\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t/2}\\ b(t) = b_0\,\mathrm{e}^{i\omega_0 t/2}\end{array}\right.$$

Puisque $|\psi\rangle(0) = |+_u\rangle$, on a $a_0 = \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}$ et $b_0 = \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}$. On en déduit l'expression dynamique de l'état :

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}}\,|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}}\,|-\rangle\,.$$

Ainsi, $|\psi(t)\rangle$ s'écrit de la même façon que $|+_u\rangle$, avec une phase $\varphi(t) = \varphi + \omega_0 t$ qui évolue dans le temps. On peut écrire $|\psi(t)\rangle = \left|+_{u(t)}\right\rangle$ avec $\vec{u}(t)$ un vecteur qui tourne dans le plan xOy à vitesse angulaire ω_0 constante.

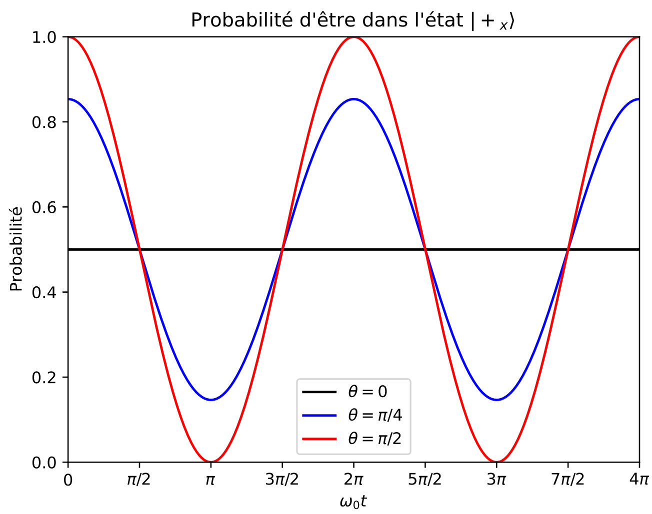
3. Déterminer les valeurs moyennes $\langle S_z\rangle$ et $\langle S_x\rangle$, ainsi que les probabilités de trouver le système dans l'état $|+\rangle$ ou $|+_x\rangle$ à un instant t.

Correction

- La probabilité d'être dans $|+\rangle$ est facile à calculer puisqu'on a exprimé ψ dans cette base. Le produit scalaire donne $|\langle +|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}$, résultat indépendant du temps. Ça rejoint le résultat classique : le moment tourne autour de Oz, sans changer sa projection.
- Concernant la projection selon $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ (obtenu avec $\theta = \pi/2$ et $\varphi = 0$), le produit scalaire donne

$$\begin{aligned}
|\langle +_x|\psi(t)\rangle|^2 &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}} + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}}\right)\right|^2 \\
&= \frac{1}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2} + 2\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{Re}\left(\mathrm{e}^{i(\varphi+\omega_0 t)}\right)\right) \\
&= \frac{1}{2}(1 + \sin\theta\cos(\omega_0 t + \varphi)).
\end{aligned}$$

Cette probabilité évolue donc avec le temps (cf. graphe ci-dessous).



- En ce qui concerne les valeurs moyennes quantiques (quantité qui se permet l'analogie avec la grandeur classique équivalente) :

$$\langle S_z\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{S}_z \middle| \psi \right\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a^\star & b^\star \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(|a|^2 - |b|^2) = \frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\hbar}{2}\cos\theta.$$

  La moyenne de $\hat{S}_z$ est donc constante dans le temps. Résultat attendu en mécanique classique.
- Quant à la moyenne de $\hat{S}_x$:

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a^\star & b^\star \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}2\,\mathrm{Re}(ab^\star) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\omega_0 t + \varphi).$$

La valeur moyenne de $\hat{S}_z$ varie sinusoïdalement, de la même façon que le vecteur quantique. Les résultats de la mécanique classique sont donc tout à fait cohérents avec ceux de la quantique... à la fréquence de rotation près ! En effet, le facteur de Landé $g = 2$ multiplie par deux la fréquence du spin quantique.

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.

Correction

Comme on l'a utilisé dans le paragraphe précédent, la valeur moyenne d'une observable $\hat{A}$ dans l'état $|\psi\rangle$ est $\left\langle \hat{A} \right\rangle_\psi = \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle$.
Le théorème d'Ehrenfest donne l'évolution de la valeur moyenne d'une observable en fonction du temps, et se démontre à partir de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left\langle \vec{\mu} \right\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle [\hat{A}, \hat{H}] \right\rangle.$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\left\langle \vec{\mu} \right\rangle}{\mathrm{d}t} = g\gamma \left\langle \vec{\mu} \right\rangle \wedge \vec{B}. \tag{5}$$

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

Correction

Appliquons le théorème d'Ehrenfest avec le hamiltonien $\hat{H} = -g\gamma S_z B$:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left\langle \vec{\mu} \right\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle [\hat{\vec{\mu}}, -g\gamma S_z B] \right\rangle = -g^2\gamma^2 B \underbrace{\left\langle [\hat{S}_x, \hat{S}_z] \right\rangle}_{=-i\hbar\left\langle \hat{S}_y \right\rangle} \vec{e_x} + \underbrace{\left\langle [\hat{S}_y, \hat{S}_z] \right\rangle}_{=i\hbar\left\langle \hat{S}_x \right\rangle} \vec{e_y} + \underbrace{\left\langle [\hat{S}_z, \hat{S}_z] \right\rangle}_{=0} \vec{e_z}.$$

Et en faisant apparaître un produit vectoriel avec $\vec{B}$:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left\langle \vec{\mu} \right\rangle}{\mathrm{d}t} = -i\hbar g^2\gamma^2 B(-\left\langle \hat{S}_y \right\rangle \vec{e_x} + \left\langle \hat{S}_x \right\rangle \vec{e_y}) = i\hbar g\gamma \begin{pmatrix} B\left\langle \hat{\mu}_y \right\rangle \\ -B\left\langle \hat{\mu}_x \right\rangle \\ 0 \end{pmatrix} = i\hbar g\gamma \left\langle \vec{\mu} \right\rangle \wedge \vec{B}.$$

Finalement

$$\frac{\mathrm{d}\left\langle \vec{\mu} \right\rangle}{\mathrm{d}t} = g\gamma \left\langle \vec{\mu} \right\rangle \wedge \vec{B}.$$

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 $\hat{S}_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$.

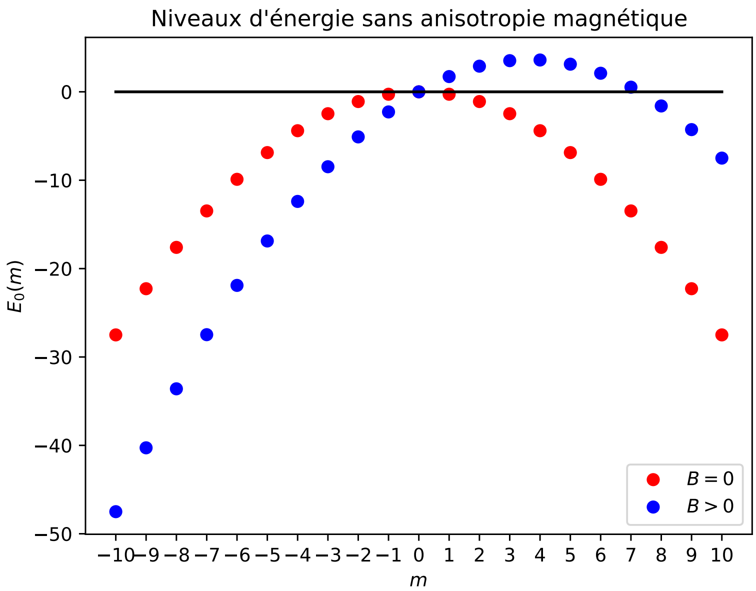
1. Pour $K = 0$, calculer les valeurs propres $E_0(m)$ du hamiltonien $\hat{H}_0$, en fonction de m le nombre quantique magnétique. Représenter graphiquement $E_0(m)$ pour $B = 0$ et $B \neq 0$. On se place à $B = 0$. Quelle est la valeur en énergie de la barrière d'anisotropie que doit passer un état de spin $m = \pm 10$ 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 $D = 0{,}275 k_\mathrm{B}$.

Correction

On connaît les états propres de $\hat{S}_z$, et le commutateur du hamiltonien avec $\hat{S}_z$ est nul. Donc ils sont aussi états propres :

$$\hat{H}_0 |m\rangle = (-Dm^2 - g\gamma B\hbar m) |m\rangle .$$

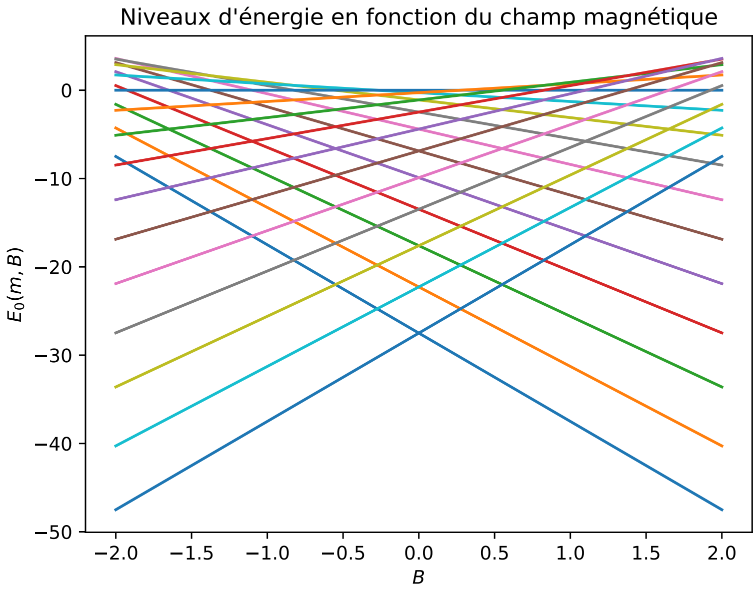
Les énergies propres de $\hat{H}_0$ sont donc les $E_0(m) = -Dm^2 - g\gamma\hbar Bm$.



Pour $B = 0$, la barrière est donnée par $k_\mathrm{B} T_c = E_0(0) - E_0(10) = 100D$. Ainsi $T_c = 100D/k_\mathrm{B} = 27{,}5$ K.

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.

Correction



On remarque que les intersections entre niveaux ont toutes lieu à des champs B bien déterminés. On écrit $E_0(m) = E_0(m')$, soit :

$$-Dm^2 - g\gamma\hbar Bm = -D(m')^2 - g\gamma\hbar Bm' \qquad \Longleftrightarrow \qquad -D(m-m')(m+m') = g\gamma\hbar B(m-m')$$

Les niveaux m et m' s'intersectent donc lorsque $B = \frac{D}{g\hbar\gamma}(m+m')$. On a donc des intersections pour tous les $B = n\frac{D}{g\hbar\gamma}$ avec n un entier relatif.

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.*

Correction

Dans la base $\{|m\rangle, |m'\rangle\}$, la matrice de $\hat{H}_0$ est diagonale avec comme valeurs $E_0(m)$ et $E_0(m')$ (qui sont identiques, et notées E_0 par la suite). Résoudre l'équation aux valeurs propres $(\hat{H}_0 + \hat{W})\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$ revient donc à résoudre

$$\begin{pmatrix} E_0+\delta & \beta \\ \beta & E_0+\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \begin{cases} (\delta+E_0)x + \beta y = Ex \\ \beta x + (\delta+E_0)y = Ey \end{cases}$$