Mécanique quantique

TD n°2 : Spin

1 Moment magnétique en mécanique classique

à savoir rapidement !

1. On considère un électron décrivant une orbite circulaire autour du noyau. Calculer son moment cinétique et son moment magnétique. Quel est le 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 $\vec{B} = B\vec{e}_z$ 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 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. Le moment magnétique d'une distribution de courant $\vec{j}$ s'écrit

$$\vec{\mathscr{M}} = \frac{1}{2}\iiint \vec{r} \wedge \vec{j}\,\mathrm{d}V \tag{1}$$

2 Moment cinétique propre ou *spin* 1/2

Comme le montre l'expérience de Stern et Gerlach, en mécanique quantique, un électron a un moment cinétique propre qui projeté selon un axe z quelconque peut prendre seulement deux valeurs : $\pm\hbar/2$.

5. Le *spin* est le moment cinétique propre d'un électron, qui n'a pas d'équivalent en mécanique classique. Si l'électron est dans un atome, quel serait l'équivalent du moment cinétique classique de la partie précédente ?

6. Soient $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les états quantiques associés à ces deux valeurs. Écrire la matrice (S_z) représentant la projection S_z du moment cinétique dans la base des états $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

On admet que les projections S_x et S_y sont représentées dans cette même base par les matrices :

$$(S_x) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad (S_y) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

7. Le moment cinétique S_u dans la direction du vecteur unitaire $\vec{u}$ est représenté par la matrice (S_u) issue du produit scalaire

$$(S_u) = \begin{pmatrix} (S_x) \\ (S_y) \\ (S_z) \end{pmatrix} \cdot \vec{u} \tag{3}$$

Exprimer la matrice (S_u) en utilisant les coordonnées sphériques pour repérer le vecteur $\vec{u}$ dans l'espace.

8. Déterminer les valeurs propres de (S_u). On admettra que les états propres associés peuvent s'écrire

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

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

9. Si un électron est préparé dans l'état $|+_u\rangle$, quelle est la probabilité qu'une mesure de son moment selon z donne $+\hbar/2$? $-\hbar/2$?

3 Moment dans un champ magnétique et précession de Larmor

On place un électron initialement préparé dans l'état $|+_u\rangle$ dans un champ magnétique $\vec{B} = B\vec{e}_z$.

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

11. En déduire l'équation d'évolution temporelle du système. Exprimer le ket $|\psi(t)\rangle$ du système à tout instant t dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

12. 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.

13. Rappeler la définition quantique d'une valeur moyenne : $\langle A \rangle$ d'une observable A.

14. En appliquant le théorème d'Ehrenfest à l'observable $\vec{\mu}$, montrer que l'équation d'évolution de $\langle \vec{\mu} \rangle (t)$ s'écrit

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

On utilisera que le commutateur $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$ où ε_{ijk} vaut 0 si deux indices sont identiques, 1 s'ils sont dans l'ordre direct, -1 sinon.

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 le hamiltonien peut s'écrire

$$H = -\frac{D}{\hbar^2} S_z^2 - \frac{g\mu_B}{\hbar} B S_z + W \tag{6}$$

où D est une constante positive, et W un opérateur faisant intervenir les opérateurs S_x et S_y.

On note $|m\rangle$ les états propres de S_z, vérifiant $S_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$.

15. Pour $K = 0$, calculer les valeurs propres $\mathscr{E}_0(m)$ du hamiltonien, en fonction de m le nombre quantique magnétique. Représenter graphiquement $\mathscr{E}_0(m)$ pour $B = 0$ et $B \neq O$.

16. Si $K \neq 0$, justifier que les $|m\rangle$ ne sont plus des états propres de H. Pour deux états $|m\rangle$ et $|m'\rangle$, on suppose que W est représenté par la matrice

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \tag{7}$$

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. Déterminer les nouvelles valeurs propres du système.

1

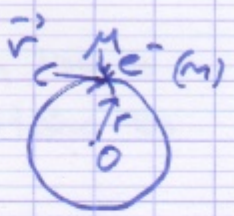
TD MQ2

TD Mécanique quantique 2

Spin

1 Moment magnétique en mécanique classique

1)



$r = cte.$ $\odot \vec{u_z}$

a savoir capitalement

moment cinétique : $L = m\vec{OM} \wedge \vec{v}$ dans un repère polaire :

$$L = \vec{r} \wedge \vec{p} = m r v \vec{u_z}$$

$$\vec{\mu} = I \cdot S \vec{u_z} = \underbrace{\left(\frac{-e}{T}\right)}_{I} \underbrace{(\pi r^2)}_{S} \vec{u_z}$$

T période de révolution $= \dfrac{v}{2\pi r}$ vitesse orbite

d'où $\vec{\mu} = \dfrac{-e}{2\pi r} v \cdot \pi r^2 \vec{u_z}$

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e v r}{2} \vec{u_z}}$$

$\boxed{\vec{\mu} = \gamma \vec{L}}$ avec $\boxed{\gamma = \dfrac{-e}{2m}}$

↳ par cœur.

2) $\vec{\mu}$ dans $\vec{B}$?

à savoir par cœur $\longrightarrow$ $$\underbrace{\frac{d\vec{L}}{dt}}_{\text{couple}} = \vec{\mu} \wedge \vec{B} = \vec{\mu} \wedge B\vec{e_z}$$

alors $\frac{1}{\gamma}\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \vec{\mu} \wedge B\vec{e_z}$ on sait pas comment est orienté $\vec{\mu}$!

alors $$\begin{cases} \frac{d\mu_x}{dt} = \gamma \mu_y B \\ \\ \frac{d\mu_y}{dt} = -\gamma \mu_x B \end{cases}$$ équations couplées.

On pose $z = \mu_x + i\mu_y$

alors $$\frac{d(\mu_x + i\mu_y)}{dt} = \gamma \mu_y B - i\mu_x B\gamma$$
$$= -i\left(\gamma B[\mu_x + i\mu_y]\right)$$
$$\frac{dz}{dt} = -i\gamma B z$$

alors $z = z_0 e^{-i\gamma B t + \varphi}$ avec z_0 = réel !

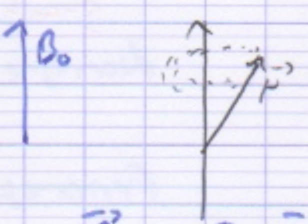
$$Re(z) = \mu_x = \overset{z_0 = \mu}{\overset{\parallel}{z_0}} \cos(\gamma B t + \varphi)$$
$$Im(z) = \mu_y = z_0 \sin(\gamma B t + \varphi)$$

TD MQ2

$$\boxed{\begin{aligned}\mu_x(t) &= \mu_{x0}\cos(\gamma B t+\varphi)\\ \mu_y(t) &= -\mu_{y0}\sin(\gamma B t+\varphi)\end{aligned}}$$

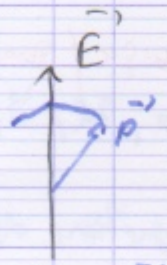
si μ initialement selon $\vec{ox} \Rightarrow \varphi=0$ on se débarasse de la phase avec les conditions initiales

rq :



$$\vec{\Gamma} = \vec{\mu}\wedge\vec{B}$$

$$\vec{\mu} = \gamma\vec{L}$$



$$\vec{\Gamma} = \vec{p}\wedge\vec{E}$$

3) Si B varie dans l'espace on aura une force !

$$\vec{F} = (\vec{\mu}\cdot\vec{\text{grad}})\vec{B}$$

Exercice 2 : Moment cinétique propre ou spin $\frac{1}{2}$

5) Ce que nous avons décrit en Q(1-3) c'est plutôt le moment cinétique orbital d'un atome, pas le moment cinétique de Spin.

Magnétisme

orbital
(description courante)

classique / quantique
$2p$, $3d$, $4f$ (ℓ)

Magnétisme de Landau
Solénoïde.

intrinsèque
(des moment existant dans la nature)

quantique
diamagnétisme de O_2

Ferromagnétisme (spin des atomes
+ interactions
proche voisin des spin)

Magnétisme de Van Vleck

Fermi

Paramagnétisme (Langevin / Brillouin)
Spin – orbite

6) On cherche une matrice

$$(S_z) = \begin{array}{cc} \text{image des vecteurs} & \\ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \rightarrow \text{projection} \\ \rightarrow \text{sur ces vecteurs.} \end{array} \end{array}$$

$$= \begin{array}{cc} f(\vec{e_1}) \quad f(\vec{e_2}) & \\ \begin{pmatrix} \quad & \quad \\ \quad & \quad \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \leftarrow \text{proj sur } \vec{e_1} \\ \leftarrow \text{proj sur } \vec{e_2} \end{array} \end{array}$$

$$= \begin{array}{cc} S_z|+\rangle \quad S_z|-\rangle & \\ \begin{pmatrix} \quad & \quad \\ \quad & \quad \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \leftarrow |+\rangle \\ \langle -|-\rangle \end{array} \end{array}$$

$$\boxed{(S_z) = \begin{pmatrix} +\frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

matrice de Pauli σ_z

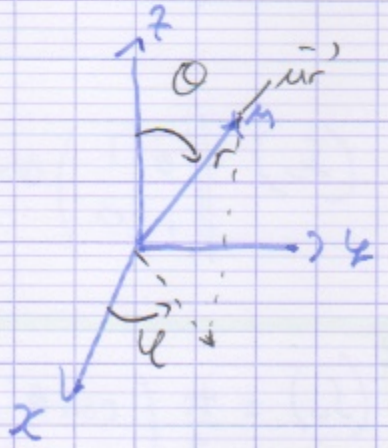
3

T.D MQ2

7) S_z représente l'opération moment cinétique sur z !

Pour obtenir cette opération sur une direction quelconque on fait l'opération :

$$S_u = \begin{pmatrix} (S_x) \\ (S_y) \\ (S_z) \end{pmatrix} \cdot \vec{u} \quad \text{avec } \vec{u} \text{ quelconque unitaire.}$$



$\vec{u} = \vec{u_r}$ avec $r = 1$ car unitaire !

- si $\theta = 0$ on est sur $\vec{u_z}$

$$\Rightarrow \vec{u} \begin{pmatrix} \sin\theta \\ \sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

si $\theta = \frac{\pi}{2}$ et $\varphi = 0$ on est sur $\vec{u_x}$

$$\Rightarrow \vec{u} \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

si $\varphi = \frac{\pi}{2}$ => on est sur $\vec{u_y}$

donc signes ⊕ !

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} +\sin\theta\cos\varphi \\ +\sin\theta\sin\varphi \\ +\cos\theta \end{pmatrix}$$

alors $(S_u) = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin\theta\sin\varphi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos\theta\right] \frac{\hbar}{2}$

$$\boxed{(S_u) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}}$$

8) Pour trouver les valeurs propres d'une matrice M :

$\boxed{MX = \lambda X}$ avec X vecteur propre $\neq \vec{0}$

λ valeur propre

définition

En pratique : $(M - \lambda Id)X = 0$ avec $X \neq 0$

ceci implique que M est non inversible et donc elle a un déterminant nul.

donc $\boxed{\mathrm{Det}(M - \lambda Id) = 0}$

4

TD MQ2

on résout alors $\det\left(\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta-\lambda & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta-\lambda\end{pmatrix}\right)=0$

avec $\frac{\hbar}{2}$ factorisé sur les cos/sin

$\Rightarrow -(\cos\theta-\lambda)(\cos\theta+\lambda) - e^{-i\varphi}e^{i\varphi}\sin\theta^2 = 0$

$\Rightarrow \lambda^2 = (\cos^2+\sin^2(\theta))\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \boxed{\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}}$

$(S_u)\,|+u\rangle = +\frac{\hbar}{2}\,|+u\rangle$

l'état $|+u\rangle$ est celui qui vaut toujours $+\frac{\hbar}{2}$ quand colinéaire à $|+u\rangle$

alors la projection sur $|+u\rangle$ donnera toujours $+\frac{\hbar}{2}\,|+u\rangle$

a) Une probabilité est toujours $P = |\langle\ |\ \rangle|^2$

alors $P_+ = |\langle + | +u\rangle|^2 = \left|\langle +|\left(e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right)\right|^2$

or $\langle + | - \rangle = 0$ et $\langle + | + \rangle = 1$

alors $P_+ = \left|e^{-i\varphi/2}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\right|^2$

$\boxed{P_+ = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}$ probabilité de trouver $|+u\rangle$ dans l'état $|+\rangle$ est $\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$

si $\theta = 0 \Rightarrow$ on est dans le sens de $\vec{Oz} \Rightarrow P = 1$

si $\theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow P = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}$ on est sur le plan (xOy)

si $\theta = \pi \Rightarrow P = 0$ car on est dans sens de $-\vec{Oz}$

pour $-\frac{\hbar}{2}$ on trouve $P = \sin^2\frac{\theta}{2}$ bien évidemment.

3 Moment dans un champ magnétique et precession de Larmor

10) E_p en mécanique classique : $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ pour un dipôle ~~fixe~~

pour un dipôle <u>induit</u> on a $-\frac{\vec{\mu}}{2}\cdot\vec{B}$

on peut écrire $H = E_c + E_p$ on oublie ici E_c

alors $\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$ (pensez que opérateur !)

on a vu que $\mu = \gamma\vec{L}$ en classique.

$$\boxed{\text{En quantique } \vec{\mu} = g\gamma\vec{S}}$$

g facteur de landé avec $g = 2$

alors $H = \cancel{2}^{\,g}\left(\frac{-e}{\cancel{2}m}\right)\vec{S}\cdot\vec{B}$ alors si $B = \vec{e_z}$

$$\boxed{\text{alors } H = \frac{+e}{m}\frac{\hbar}{2}B\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z}$$

5

TD2MQ

11) $E_p = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ $\qquad \vec{\mu} = \gamma \vec{L}$

$H = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$ $\qquad \hat{\vec{\mu}} = g \gamma \vec{S} \to \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$H = -\gamma \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$

↳ tout le temps vrai

On se place dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\} \Rightarrow \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

ceci a été fait à la § précédente.

supposons $|\psi(0)\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$

on pose $|\psi(t)\rangle = a(t)|+\rangle + b(t)|-\rangle$

donc $|\psi(t)\rangle$ vérifie Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \left(\frac{da}{dt}|+\rangle + \frac{db}{dt}|-\rangle \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(a|+\rangle - b|-\rangle \right)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\cancel{\hbar} \dfrac{da}{dt} = \dfrac{\cancel{\hbar}\omega_0}{2} a \\[2ex] i\cancel{\hbar} \dfrac{db}{dt} = -\dfrac{\cancel{\hbar}\omega_0}{2} b \end{cases}$$

donc $a(t) = a(0)\, e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}}$

$b(t) = b(0)\, e^{i\omega_0 \frac{t}{2}}$

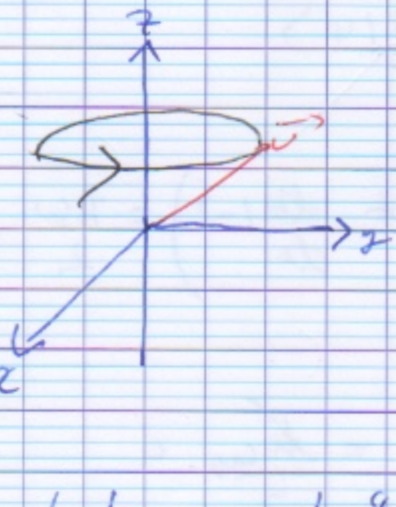
donc $|\psi(t)\rangle = a(0)\, e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} |+\rangle + b(0)\, e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} |-\rangle$

à $t=0$ $|\psi(0)\rangle = |+u\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\rangle$
$+ e^{i\varphi/2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |-\rangle$

d'où $\boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{\omega_0 t}{2}\right)} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i}{2}(\varphi + \omega_0 t)}}$

donc $|\psi(t)\rangle = |+_{u(t)}\rangle$ $u(t) \begin{pmatrix} 1 \\ \theta \\ \varphi + \omega_0 t \end{pmatrix}$

donc



precession autour du Champ magnétique !

Pour faire le lien avec la "classique" il faut calculer les probabilités et les observables :

12) $\langle S_z \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle$

$\langle S_x \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle$

6

TD2MQ

Proba d'être dans $|+\rangle$: $= |\langle + | \psi(t)\rangle|^2$

" $|+_z\rangle$: $= |\langle +_x | \psi(t)\rangle|^2$

$$\langle S_z\rangle_{\psi(t)} = \left(a_0(t)^*, b_0(t)^*\right)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0(t) \\ b_0(t) \end{pmatrix}$$

$$= \left(a_0(t)^*, b_0(t)^*\right)\begin{pmatrix} a_0(t) \\ -b_0(t) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(|a_0(t)|^2 - |b_0(t)|^2\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right) = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

$$\langle S_x\rangle_{\psi(t)} = \left(a^*(t), b^*(t)\right)\begin{pmatrix} b(t) \\ a(t) \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(a^*(t)\, b(t) + b^*(t)\, a(t)\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\left(e^{i(\omega t + \varphi)} + e^{-i(\omega t+\varphi)}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\cos(\omega t + \varphi)\sin(\theta)$$

↳ precession

Proba d'être dans $|+\rangle$: $\left| \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\omega_0 t)} \right|^2 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$

Proba d'être dans $|-\rangle$: $|\langle +x | \psi(t)\rangle|^2$

$$= \left| \frac{\langle +| + \langle -|}{\sqrt{2}} |\psi(t)\rangle \right|$$

$$= \frac{1}{2}\left(1 + \sin\theta \cos(\omega_0 t + \varphi)\right)$$

$\Rightarrow$