Mécanique quantique

TD n°2 : Spin

1 Moment magnétique en mécanique classique

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

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

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.

arnaud.raoux@sorbonne-universite.fr

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

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

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.