EXAMEN DE PREMIERE SESSION - DECEMBRE 2020

3 heures, Feuille A4 RV manuscrits autorisées

A. La molécule Fe_8 est constituée de 8 atomes de fer tenus entre eux par des ligands. Les interactions magnétiques dans la molécule entraînent l'orientation de six spins atomiques selon l'axe Oz et deux de facon antiparallèle. La molécule Fe_8 est alors un macrospin de spin $S = 10$ pour lequel le Hamiltonien s'écrit

$$H = -DS_z^2/\hbar^2 + K(S_x^2 - S_y^2)/\hbar^2 - 2\mu_B B_z S_z/\hbar$$

en présence d'un champ magnétique selon Oz (μ_B est le magnéton de Bohr). On note $\{|m>\}$ la base orthonormée des états propres de S_z qui sera utilisée tout au long de cet exercice ($m \in [-10, 10]$).

1. Pour K = 0, montrez que les vecteurs $|m>$ sont bien vecteurs propres du Hamiltonien et donner les valeurs propres $\epsilon^{(0)}(B_z, m)$.
2. On note $\Delta_{mm'}(B_z) = \epsilon^{(0)}(B_z, m) - \epsilon^{(0)}(B_z, m')$. Le système est initialement dans l'état $|m>$, que vaut la probabilité $P_{m\to m'}(B_z, t)$ (à $T = 0$ K) de passer dans l'état $|m'>$ pour $\Delta_{mm'} > 0$. Au dessus de quelle température cette transition pourra-t-elle se produire ?
3. Tracez (*shématiquement*) les courbes $\epsilon^{(0)}(B_z, m)$ en fonction de B_z pour $-2 \leq m \leq 2$ et donnez les valeurs de B_z pour lesquels $\Delta_{mm'} = 0$.
4. Pour $K \neq 0$ les $|m>$ ne sont plus des états propres de H et dans la suite on traitera $W = K/\hbar^2(S_x^2 - S_y^2)$ comme une perturbation. On note $\beta =< m|W|m' >=< m'|W|m >$ et $\delta =< m|W|m >=< m'|W|m' >$. Donnez les variations de lénergies $\epsilon^{(i)}(B_z, m)$ au premier ($i = 1$) et deuxième ($i = 2$) ordre en perturbation loin des points de croisement.
5. Bien que la température soit trop faible pour permettre de passer d'un niveau à l'autre par activation thermique, on observe expérimentalement que cette transition a lieu, comment est-ce possible ? Donnez l'expression de $P_{m\to m'}(B_z, t)$ pour $K \neq 0$ (toujours dans le cas $\Delta_{mm'} >> \delta$).
6. On cherche désormais à calculer $\epsilon^{(1)}(B_z)$ aux points de croisement. Rappelez brièvement en quoi le traitement de ce cas est différent (pour un calcul en perturbation du premier ordre). Donnez $\epsilon^{(1)}$ et tracez (toujours shématiquement) l'évolution des énergies en fonction de B_z (pour $-2 \leq m \leq 2$).
7. (question de cours) On se place maintenant dans le cas $D = K = 0$ et on s'intéresse à l'influence du moment cinétique dans $H = -\mu_B(L_z + 2S_z).B_z/\hbar + \lambda_{SO}\vec{L}.\vec{S}$. Rappelez comment sont définis les états propres $|J>$ du terme $\lambda_{SO}\vec{L}.\vec{S}$. A quelle condition peut-on traiter le terme $H = -\mu_B(L_z + 2S_z).B_z/\hbar$ comme une perturbation (en utilsant donc la base $\{|J>\}$). Montrez que dans ce cas le vecteur $\vec{J}$ précesse autour du champ magnétique [1].

---

1. on pourra utiliser pour cela la relation d'Ehrenfest $d < A > /dt =< [A, H] > /i\hbar$ et on rappelle que $[J_i, J_j] = i\hbar J_k$

B. Dans le cas des composés supraconducteurs, le nombre de particules, n n'est pas défini. Si on note N l'opérateur "nombre de particules", la fonction d'onde $|\Phi>$ ne sera donc plus un état propre de cet opérateur ($N|\Phi> \neq n|\Phi>$) mais

$$N|\Phi> = -i\frac{d|\Phi>}{d\phi}$$

où ϕ est la phase de la fonction d'onde.

1. Montrer que toute variation α de la phase peut être calculée par $|\Phi(\phi+\alpha)> = S(\alpha)|\Phi(\phi)>$ où $S(\alpha)$ est un opérateur dont on donnera l'expression.
2. De quel groupe de symétrie N est-il le générateur ? Que peut-on alors dire de $\Delta n \Delta \phi$?[2] Citez d'autres couples de grandeurs physiques pour lesquelles une relation similaire s'applique.

C. Soit un oscillateur harmonique (à 1 dimension) d'Hamiltonien $H_0 = p^2/2m + kx^2/2$. On rappelle que les états propres $|\Phi_n^0(x)>$ de H_0 répondent aux relations de récurrence suivantes :

$$\xi|\Phi_n^0> = \sqrt{n/2}|\Phi_{n-1}^0> + \sqrt{(n+1)/2}|\Phi_{n+1}^0>$$

où $\xi = x/\sigma$, $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $\omega = \sqrt{k/m}$ et l'état fondamental est :

$$< x|\Phi_0^0> = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} exp(-x^2/2\sigma^2)\ .$$

1. Rappelez (sans démonstration) quel est le spectre en énergie de H_0 et donnez l'expression de $< x|\Phi_1^0>$?
2. Soit $H = H_0 + cx$ où le terme cx sera traité comme une perturbation. Calculez la variation en énergie due à cx pour $n = 1$ au premier puis au second ordre en perturbation.
3. Pourrait-on (toujours dans le cas $n = 1$) utiliser une approche variationnelle pour faire ce calcul (justifiez votre réponse en indiquant notamment, le cas échéant, la fonction d'essai que vous suggéreriez d'utiliser).
4. Le système était initialement (pour $t < 0$) dans l'état $n = 1$ et la perturbation est appliquée à partir de $t = 0$. Vers quel(s) état(s) le système est-il susceptible d'évoluer ? Donner les probabilités de transition $P_{1\to n}(t)$ pour chacun de ces états.

2. si $\Delta n \to \infty$, la phase de la fonction d'onde n'est plus aléatoire pas parfaitement déterminée, cette spécificité des supraconducteurs s'appellent "brisure de symétrie de jauge".