Mécanique Quantique L3-PHYSIQUE

EXAMEN DE PREMIERE SESSION - MAI 2014

3 heures, documents manuscrits autorisés

A. On considère un système à deux niveaux dont le Hamiltonien H est représenté par la matrice $\begin{pmatrix} A & B \\ B & -A \end{pmatrix}$ dans la base $|\phi_1>, |\phi_2>$.

1. Donnez les vecteurs propres de H (que l'on notera : $\chi_1 >$ et $|\chi_2 >$) en fonction de $|\phi_1 >$ et $|\phi_2 >$ ainsi que les valeurs propres correspondantes [on notera $cos(\theta) = A/\sqrt{A^2+B^2}$ et $sin(\theta) = B/\sqrt{A^2+B^2}$].
2. On s'intéresse à l'évolution temporelle d'un état $|\Phi(t) >= c_1(t)|\phi_1 > +c_2(t)|\phi_2 >$. Ecrire le système d'équations différentielles couplées auquel obéissent les composantes $c_1(t)$ et $c_2(t)$. En déduire que $c_1(t)$ (de même que $c_2(t)$) vérifie l'équation différentielle : $\ddot{c_1} + (\Omega/2)^2 c_1 = 0$ où Ω est une constante dont on précisera la signification physique.
3. On note λ et μ les composantes de $|\Phi(0) >$ (à $t = 0$ donc) dans la base $\chi_1 >, |\chi_2 >$. Montrer que $c_1(t)$ sécrit : $c_1(t) = \lambda e^{-i\Omega t/2} cos(\theta/2) - \mu e^{i\Omega t/2} sin(\theta/2)$.
4. On suppose que $c_1(0) = 0$. En déduire λ et μ (à une phase près). Montrer que la probabilité de trouver le système au temps t dans l'état 1 est : $P_1(t) = sin^2(\theta) sin^2(\Omega t/2)$.
5. De même calculer $c_1(t)$ et $P_1(t)$ si $c_1(0) = 1$ et vérifier la compatibilité du résultat avec celui de la question précédente.

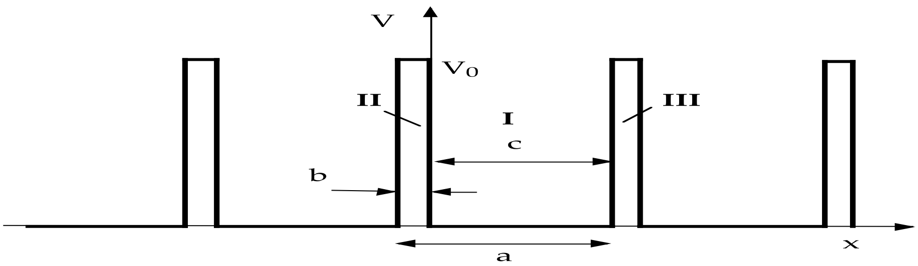
B. La molécule Fe_8 est constituée de 8 atomes de fer tenus entre eux par des ligands. Les interactions magnétiques dans la molécule entraînent l'orientation de six spins atomiques selon l'axe Oz et deux de facon antiparallèle. La molécule Fe_8 est alors un macrospin de spin $S = 10$ pour lequel le Hamiltonien s'écrit $H = -D/\hbar^2 S_z^2 + K/\hbar^2(S_x^2 - S_y^2) - g\mu_B/\hbar B_z S_z$ en présence d'un champ magntique selon Oz (μ_B est le magnéton de Bohr ($q\hbar/2m$) et g le facteur deLandé (g=2)).On note $|m >$ la base orthonormée des tats propres de S_z qui sera utilisée tout au long de ce problème ($m \in [-10, 10]$).

1. Pour K = 0, montrez que les vecteurs $|m >$ sont bien vecteurs propres du Hamiltonien et donner les valeurs propres $\epsilon_0(m)$. On appelle barrière danisotropie la barrière de potentiel que doit franchir un spin pour basculer dans l'état $S = -10$ à $S = +10$ en champ nul. Exprimez la valeur de cette barrière en fonction de D, en déduire la temprature critique T_c en dessous de laquelle il ne sera plus possible pour une molécule d'être thermiquement activée pour passer la barrière.
2. Représentez le diagramme $\epsilon_0(m)$ pour un champ $B_Z \neq 0$ et tracez sur un même graphique, les courbes $\epsilon_0(B_z)$ pour m = -10, -9,...., +10 . Montrer que les énergies des états $m \leq 0$ et celles des états $m \geq 0$ se croisent pour des valeurs de B_z vérifiant : $B_z = nD/g\mu_B$ où n est un entier relatif.
3. On considère à présent deux niveaux m et m' et on se place près du champ B_z pour lequel $\epsilon_0(m) = \epsilon_0(m')$. On note $W = K/\hbar^2(S_x^2 - S_y^2)$, $\beta =< m|W|m' >=< m'|W|m >$ et

$\delta =< m|W|m >=< m'|W|m' >$. Montrez que les états $|m >$ ne sont plus états propres du Hamiltonien lorsque $K \neq 0$ et exprimez β et δ en fonction de m, m', $< m|S_x^2|m' >$ et $< m|S_x^2|m >$.

4. On cherche un nouvel état propre sous la forme $|\Psi >= x|m > +y|m' >$ avec x et y deux complexes [1]. Déterminez les deux énergies propres (ϵ_1) du Hamiltonien en fonction de $\epsilon_0(m, B_z)$, $\epsilon_0(m', B_z)$, β et δ. Tracez shématiquement l'évolution des deux valeurs de ϵ_1 en fonction de B_z et donnez lécart énergétique minimal séparant ces deux niveaux.
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 ?

C. 0n considère le potentiel <u>périodique</u> (de période a) défini par la figure ci-dessous (modèle de Kronig-Penney) :



On note respectivement $\Phi_I(x)$, $\Phi_{II}(x)$ et $\Phi_{III}(x)$ les expressions de l'état stationnaire d'énergie E dans les régions notées I, II et III de la figure. On suppose que : $0 < E < V_0$ et on note $K = \sqrt{2mE/\hbar}$, $Q = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$ et $P = Q^2ab/2$.

1. Montrer que Φ_I et Φ_{II} peuvent s'écrire sous la forme : $\Phi_I(x) = Acos(Kx)+Bsin(Kx)$ et $\Phi_{II}(x) = Acosh(Qx) + B(K/Q)sinh(Qx)$, où A et B sont deux constantes.
2. On peut montrer que, pour $-b < x < 0$, $\Phi_{III}(x + a) = \Phi_{II}(x)e^{ika}$ où k est un réel (théorème de Bloch). Que peut-on dire de $|\Phi|^2$, quelle est le sens du terme e^{ika} ?
3. Utilisez les équations de continuité en $x = c$ pour montrer que A et B sont non nulles si et seulement si : $cos(ka) = cos(Kc)cosh(Qb) + sin(Kc)sinh(Qb)(Q^2 - K^2)/2KQ$.
4. Montrer que pour des barrières très hautes ($V_0 >> E$) et fines (avec $Qb \to 0$), la condition obtenue en Q.3 devient : $P.sinc(Ka) + cos(Ka) = cos(ka)$. Tracez les deux termes de cette équation en fonction de Ka. En déduire que, si $P \neq 0$, il existe certaines gammes de Ka (donc de E) pour lesquelles le système n'a pas de solution (ces gammes sont appelées "gaps").
5. Quelles sont les seules valeurs de l'énergie permises si $P \to \infty$. A quoi correspondent alors ces énergies ?
6. Exprimez E en fonction de k lorsque $P = 0$, justifiez le résultat obtenu.

---

1. cette approche dite perturbative est valable si $W << H_0$ où H_0 est le Hamilotonien pour K=0.