Examen de physique quantique et statistique, 14 Novembre 2014

PHELMA PNS 2A

Désaimantation adiabatique

On considère deux électrons localisés dans une même orbitale atomique de moment cinétique nul, d'opérateurs de spin-1/2 $\mathbf{S}_i$ respectifs avec $i = 1, 2$. On applique un champ magnétique uniforme et constant $\mathbf{B} = B\mathbf{u}_z$. Le moment magnétique (ou aimantation) de la paire d'électrons est un opérateur donné par $\hat{\mathbf{M}}_p = -g_s\mu_B(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)/\hbar$, où on prendra $g_s = 2$. L'hamiltonien du système s'écrit

$$\hat{H} = -\hat{\mathbf{M}}_p \cdot \mathbf{B} + \frac{J}{\hbar^2}\,\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2.$$

Le terme de gauche est l'énergie d'interaction des spins avec le champ magnétique, celui de droite l'énergie d'interaction des deux spins entre eux. Le magnéton de Bohr μ_B et l'énergie d'échange J sont des constantes positives. On pourra noter $b = g_s\mu_B B$.

On note la base canonique du système de spins $\{|\pm,\pm\rangle\}$, où p. ex. $|+,-\rangle$ est l'état où le spin #1 est dans l'état propre de $\hat{S}_{1z}$ de valeur propre $+\hbar/2$ et le spin #2 dans l'état propre de $\hat{S}_{2z}$ de valeur propre $-\hbar/2$.

Définissez les opérateurs $S_{i\pm}$ et écrivez l'action de ces quatre opérateurs dans la base canonique. Que vaut $S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}$?

1.) Montrez que les quatre vecteurs

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle),$$

$$|t_+\rangle = |+,+\rangle,$$

$$|t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle),$$

$$|t_-\rangle = |-,-\rangle$$

forment une base de diagonalisation orthonormée de $\hat{H}$, dont on montrera que les valeurs propres respectives sont $-3J/4$, $J/4 + b$, $J/4$ et $J/4 - b$. Pour cela on pourra commencer par écrire l'action de $\hat{H}$ sur chaque vecteur de la base canonique.

2.) Tracer ces quatre énergies en fonction de B. Quel est l'état fondamental (de plus basse énergie) de $\hat{H}$ en fonction de B ?

3.) Montrez que les quatre états ci-dessus sont états propres de $\hat{M}_{pz}$ et donnez les valeurs propres associées.

4.) Ecrire la fonction de partition Z_p de cette paire d'électrons, à l'équilibre avec un réservoir à la température T (conseil : factoriser le résultat par $e^{-\beta J/4}$, où $\beta = 1/k_B T$).

5.) Calculez l'aimantation moyenne statistique de la paire.

6.) Calculez aussi l'énergie interne U_p et l'énergie libre F_p de la paire.

7.) En utilisant les résultat ci-dessus, montrer que l'entropie de la paire peut s'écrire

$$S_p = k_B \ln(e^{\beta J} + 1 + 2\,\mathrm{ch}(\beta b)) - k_B \beta \, \frac{J e^{\beta J} + 2b\,\mathrm{sh}(\beta b)}{e^{\beta J} + 1 + 2\,\mathrm{ch}(\beta b)}.$$

8.) Calculez U_p et S_p dans le cas $J = 0$. On utilisera la relation $\mathrm{sh}(x)/(1 + \mathrm{ch}(x)) = \mathrm{th}(x/2)$. Discutez.

9.) Quelle est la valeur limite de S_p à très haute température dans chacun des deux cas, $J > 0$ et $J = 0$? Même question pour $T \to 0$. Commenter.

10.) On considère N paires discernables d'électrons, identiques à celle décrite ci-dessus. On suppose ces paires suffisamment éloignées les unes des autres pour pouvoir les considérer sans interaction entre elles. Ecrire l'énergie interne, l'entropie et l'aimantation du système total, notées U, S et M.

11.) Dans la suite on se limitera au cas $J = 0$ pour simplifier les calculs. Justifiez que l'entropie est invariante lorsque B et T sont multipliés par le même facteur. Sur un graphique avec une échelle des abscisses logarithmique tracez schématiquement $S(T)$ pour deux valeurs du champ B_1 et B_2, différentes p.ex. d'un facteur 10 ($B_2 < B_1$).

12.) On considère le système ci-dessus à l'équilibre thermodynamique à une température T_1 sous un champ appliqué B_1. Le système est alors découplé thermiquement du monde extérieur, puis le champ est très progressivement réduit jusqu'à atteindre la valeur B_2. Nous supposerons que cette transformation est adiabatique, c'est à dire qu'il n'y a ni transfert ni création de chaleur Q. De $\delta S = \delta Q/T$, on déduit que cette transformation est donc isentropique. Montrer qu'elle conduit à un refroidissement du système. Que vaut la température finale T_2 ?