DM Phy432 mars 2009. Eléments de correction. (Xavier Blase)

Réflexion d'un faisceau de neutrons sur un ferromagnétique.

1) Dans l'espace produit $\mathcal{E}_{externe} \bigotimes \mathcal{E}_{interne}$, où l'espace $\mathcal{E}_{interne}$ est celui des variables de spin, l'hamiltonien s'écrit : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \bigotimes \mathbf{I}$ pour $x < 0$ et $\hat{H} = (\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0) \bigotimes B_0 \hat{\mu}_z$ pour $x \geq 0$. Partout dans l'espace, l'opérateur "composante de spin selon l'axe Oz" ($\hat{\sigma}_z$, ou plus précisemment $I \bigotimes \hat{\sigma}_z$) commutent avec le hamiltonien. On peut donc effectivement factoriser les états propres sous la forme proposée (les facteurs $\alpha_\pm$ sont juste des facteurs de normalisation plutôt inutiles de fait). L'action de l'hamiltonien sur ces états factorisés conduit à un problème de barrière du type traité en cours pages 69-70 mais avec les états $\psi^+(E)(x)$ et $\psi^-(E)(x)$ qui "voient" une barrière différente ($V_0 + \hbar\omega_0/2$ et $V_0 - \hbar\omega_0/2$ respectivement). Note : pour un neutron (comme pour un électron), la quantité μ_0 est négative, et donc $\hbar\omega_0$ bien positive comme indiqué.

Cette factorisation des variables internes et externes ne dépend pas bien sur de l'énergie des neutrons incidents. En revanche, la forme des états $< x|\psi^\pm(E) >= \psi^\pm_E(x)$ en dépend conformement au cours sur la réflexion/transmission d'une onde plane incidente sur une marche de potentiel (pages 69-71). On utilisera les notations $p = \sqrt{2mE}$, $\kappa^\pm = \sqrt{2m(V_0 \pm \hbar\omega_0/2 - E)}$ si $(E < V_0 \pm \hbar\omega_0/2)$, et $k^\pm = \sqrt{2m(E - (V_0 \pm \hbar\omega_0/2))}$ si $(E \geq V_0 \pm \hbar\omega_0/2)$.

Région $x \leq 0$. Dans cette région les particules sont libres et les fonctions d'ondes $\psi^\pm_E(x)$ s'écrivent :

$$\psi^\pm_E(x) = \alpha^\pm e^{ipx/\hbar} + c^\pm e^{-ipx/\hbar} = \alpha^\pm \left(e^{ipx/\hbar} + r^\pm e^{-ipx/\hbar}\right) \quad \text{avec} \quad r^\pm = c^\pm/\alpha^\pm$$

Région x≥0. Il faut considérer les trois cas distincts :

$$E < V_0 - \hbar\omega/2. \text{ Alors } \psi^\pm_E(x) = \beta^\pm e^{-\kappa^\pm x/\hbar} \text{ (ondes evanescentes dans le solide.)}$$

$$V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2. \text{ Alors } \begin{cases} \psi^+_E(x) &= \beta^+ e^{-\kappa^+ x/\hbar} \text{ (ondes evanescentes dans le solide.)} \\ \psi^-_E(x) &= \beta^- e^{ik^- x/\hbar} \text{ (ondes propagatives dans le solide.)} \end{cases}$$

$$E \geq V_0 + \hbar\omega_0/2, \text{ Alors } \psi^\pm_E(x) = \beta^\pm e^{ik^\pm x/\hbar} \text{ (ondes propagatives).}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivé en x=0 conduisent en particulier à :

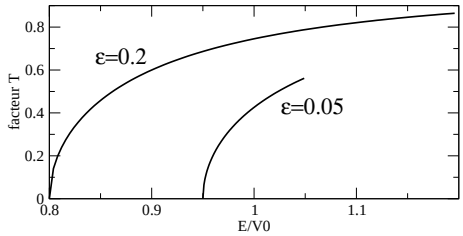
$E < V_0 - \hbar\omega_0/2$	$V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$	$E \geq V_0 + \hbar\omega_0/2$
$r^\pm = \frac{p - i\kappa^\pm}{p + i\kappa^\pm}$	$r^+ = \frac{p - i\kappa^+}{p + i\kappa^+}$ et $r^- = \frac{p - k^-}{p + k^-}$	$r^\pm = \frac{p - k^\pm}{p + k^\pm}$

Dans les cas d'une onde transmise évanescente, on remarque que $|r| = 1$ comme attendu : il y a réflexion totale (avec déphasage cependant).

2) Si le faisceau incident est non polarisé, on a nécessairement autant de neutrons incidents dans l'état ψ^+ que dans l'état ψ^- ce qui se traduit par $|\alpha^-|^2 = |\alpha^+|^2$ et le taux de polarisation du faisceau réfléchi est donc :

$$T = \frac{|c^+|^2 - |c^-|^2}{|c^+|^2 + |c^-|^2} = \frac{|r^+|^2 - |r^-|^2}{|r^+|^2 + |r^-|^2} = \frac{1 - |r^-|^2}{1 + |r^-|^2} = \frac{(p + k^-)^2 - (p - k^-)^2}{(p + k^-)^2 + (p - k^-)^2} = \frac{2pk^-}{p^2 + (k^-)^2} \tag{1}$$

Dans ce cas intermédiaire, l'état ψ^+ est totalement réfléchi, alors que l'état ψ^- ne l'est que partiellement, ce qui entraine un déséquilibre dans la densité de neutrons réfléchis de spins $|+>$ et neutrons réfléchis de spins $|->$. Nous obtenons alors les courbes suivantes pour deux valeurs de $\epsilon = \hbar\omega_0/2V_0$:



On peut donc polariser en spin un faisceau incident initialement non polarisé. Plus le rapport ϵ est grand, plus le facteur T, et donc la polarisation de spin du faisceau réfléchi, peut être grand. En effet, plus ϵ est grand, plus les barrières vues par $\psi^+(x)$ et $\psi^-(x)$ différent.

3) De nouveau, il s'agit ici de poser les définitions. Le faisceau incident est dans l'état de spin : $|+>_x = (|+>_z + |->_z)/\sqrt{2}$. Comme l'hamiltonien est un opérateur linéaire, le principe de superposition nous dit que l'onde réfléchie s'écrit (pour $x \leq 0$) : $e^{-ipx/\hbar} \otimes |\Sigma>$ avec : $|\Sigma> = A\,(c^+|+>_z + c^-|->_z)$, A facteur de normalisation. Comme nous l'avons fait en PC2, nous écrivons (en utilisant les matrices de Pauli dans la base $|\pm>_z$) :

$$\hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mu}_y = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

et les valeurs moyennes demandées deviennent :

$$\begin{aligned} <\Sigma|\hat{\mu}_z|\Sigma> &= |A|^2\mu_0\left(|c^+|^2 - |c^-|^2\right) = |A|^2\mu_0\left(|r^+|^2 - |r^-|^2\right)/2 \\ <\Sigma|\hat{\mu}_x|\Sigma> &= |A|^2\mu_0 2Re\left[(c^+)^* c^-\right] = |A|^2\mu_0 Re\left[(r^+)^* r^-\right] \\ <\Sigma|\hat{\mu}_y|\Sigma> &= |A|^2\mu_0 2Im\left[(c^+)^* c^-\right] = |A|^2\mu_0 Im\left[(r^+)^* r^-\right] \end{aligned}$$

où nous avons utiliser le fait que $\alpha^\pm = 1/\sqrt{2}$. On injecte alors les valeurs de r^+ et r^- écrites ci-dessus dans les trois cas.

Cas 1 : $E > V_0 + \hbar\omega_0/2$**.**

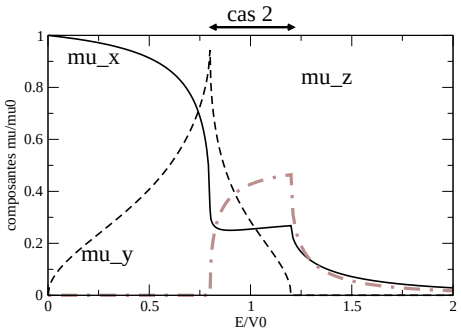
$$\frac{<\hat{\mu}_x>}{|A|^2\mu_0} = \left(\frac{p-k^+}{p+k^+}\right)\left(\frac{p-k^-}{p+k^-}\right), \qquad \frac{<\hat{\mu}_y>}{|A|^2\mu_0} = 0, \qquad \frac{2<\hat{\mu}_z>}{|A|^2\mu_0} = \left(\frac{p-k^+}{p+k^+}\right)^2 - \left(\frac{p-k^-}{p+k^-}\right)^2$$

Cas 2 : $V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$**.**

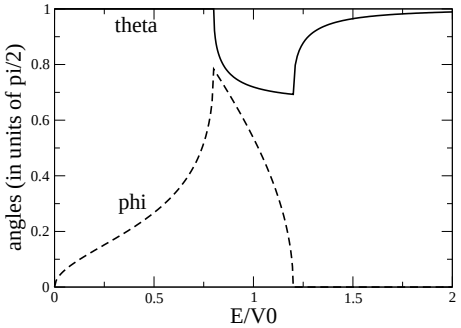
$$\frac{<\hat{\mu}_x>}{|A|^2\mu_0} = \left(\frac{p^2-(\kappa^+)^2}{p^2+(\kappa^+)^2}\right)\left(\frac{p-k^-}{p+k^-}\right), \qquad \frac{<\hat{\mu}_y>}{|A|^2\mu_0} = \left(\frac{-2p\kappa^+}{p^2+(\kappa^+)^2}\right)\left(\frac{p-k^-}{p+k^-}\right), \qquad \frac{2<\hat{\mu}_z>}{|A|^2\mu_0} = 1-\left(\frac{p-k^-}{p+k^-}\right)^2$$

Cas 3 : $E < V_0 - \hbar\omega_0/2$**.** Expressions pour $<\hat{\mu}_x>$ et $<\hat{\mu}_x>$ assez pénibles. En revanche, $<\hat{\mu}_z> = 0$.

En utilisant pour illustration la valeur $\hbar\omega_0/2V_0 = 0.2$, on trace les valeurs moyennes $<\hat{\mu}_x>$, $<\hat{\mu}_y>$, et $<\hat{\mu}_z>$ en fonction de E (normalisées par la valeur maximum de $<\hat{\mu}_x>$ en E=0) :



Cette évolution peut se traduire en terme de rotation du spin en introduisant les angles (θ, ϕ) tels que : $< \Sigma|\hat{\mu}_z|\Sigma > /|A|^2 = \mu_0(cos\theta)$, $< \Sigma|\hat{\mu}_x|\Sigma > /|A|^2 = \mu_0(sin\theta)(cos\phi)$, $< \Sigma|\hat{\mu}_y|\Sigma > /|A|^2 = \mu_0(sin\theta)(sin\phi)$.



Dans le cas où $E \leq V_0 - \hbar\omega_0/2$, les deux composantes $| + z >$ et $| - z >$ sont intégralement réfléchies ($|r^{\pm}| = 1$) avec juste un déphasage introduit par la différence de phase entre r^+ et r^- : le vecteur aimantation moyen tourne dans le plan xOy. Dans le cas intermédiaire, la composante $| + z >$ est totalement réfléchie ($|r^+| = 1$), alors que la composante $| - z >$ ne l'est que partiellement : il se crée un déséquilibre entre le poids des composantes $| \pm z >$ qui se traduit par l'apparition d'une valeur non nulle de $< \Sigma|\hat{\mu}_z|\Sigma >$.

L'effet Zeeman orbital. Exercice standard utilisant la théorie des perturbations et assez proche de la PC4 sur l'effet Stark. Dans cet exercice, on néglige la variable interne de spin.

1) On notera les états propres de l'atome d'hydrogène $|nlm >$ avec $< \mathbf{r}|nlm >= \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$, Y_{lm} harmonique sphérique telle que $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$ et $\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$.

L'hamiltonien de perturbation s'écrit : $\hat{H}_{mag} = q\hat{L}_z B/(2m_e)$ avec l'opérateur $\hat{L}_z$ qui agit sur les états propres $|nlm >$ de l'atome d'hydrogène selon : $\hat{L}_z|nlm >= m\hbar|nlm >$. L'état fondamental $|100 >$ est non-dégénéré et on applique donc la théorie de perturbation au premier ordre dans le cas non-dégénéré (question A3 de la PC4 et cours page 195) : $\Delta E =< 100|H_{mag}|100 >$ qui est nul puisque m=0 pour le fondamental. Au premier ordre, il n'y a pas de déplacement.

2) Le niveau (n=2) est dégénéré 4-fois puisque l'état $|200 >$ (état 2s avec n=2, l=m=0) et les états $|21m >$ (état 2p avec n=2, l=1, m=-1,0,1) sont à la même énergie $E_2 = -E_I/n^2$ avec n=2 (E_I= 1 rydberg=13.6 eV). Il faut donc appliquer la théorie de perturbation d'un niveau dégénéré (question C de la PC4 et cours page 195-196), c'est-à-dire **diagonaliser la restriction de la perturbation H_{mag} au**

sous-espace (n=2).

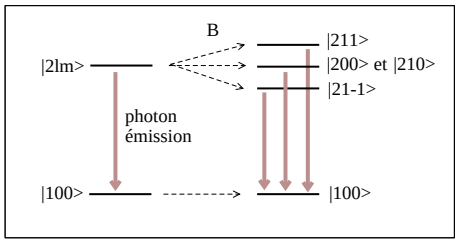
Dans le cas présent, la diagonalisation est triviale car les états $|nlm>$ sont des états propres de H_{mag} avec $H_{mag}|nlm>= m(qB\hbar/2m_e)|nlm>$. H_{mag} est donc diagonal dans la base $|2lm>$ du niveau (n=2). Les états avec (m=0) ne sont pas déplacés (états 2s et $2p_z$) alors que les états $|21m>$ avec m=±1 sont déplacés de $\pm(qB\hbar/2m_e)$. Il y a levée partielle de la dégénerescence et apparition de 3 niveaux d'énergie dont la séparation $(qB\hbar/2m_e)$ croît avec le champ.

Attention : en général, la perturbation n'a aucune raison d'être diagonale dans la base choisie du sous-espace considéré. Ne prendre que les termes $< n|\hat{W}|n >$ sur la diagonale (avec les notations de la PC4) est donc faux ! ! Il faut vraiment diagonaliser la matrice $[W_{nm}] =< n|\hat{W}|m >$ dans le sous-espace de dégénerescence pour avoir les corrections aux énergies et les vecteurs propres perturbés.

3) Résultats inchangés car l'atome d'hydrogène est un système à symmétrie sphérique.

4) On calcule : $qB\hbar/2m_e = 5.8 \times 10^{-6}$ eV qui est bien négligeable devant la différence d'énergie entre le niveau n=2 et les niveaux voisins n=1 et n=3, avec $E_n^0 = -13.6/n^2$ eVs.

4) Comme nous l'avons vu, le niveau n=1 ne bouge pas au première ordre et le niveau n=2 est éclaté en trois sous niveau. La raie d'émission (n=2 $\rightarrow$ n=1) devient triple quand on allume le champ magnétique.



5) **Complément.** Voir correction paragraphe 5.3 page 322 du cours).