

Magnétisme.



References:

[1] Du TRENOLET, "Magnétisme - I - Fondements."

[2] GARING, "Magnétisme : statique, induction et milieu."

[3] LEVY, "Magnétisme et supraconductivité."

[4] BASDEVANT, "Physique quantique."

I) Histoire du magnétisme.

[1]

→ Présence d'objets en fer dans les tombes de diverses civilisations de l'Antiquité (Sémites, égyptiens, grecs...) mais on ne sait pas trop si ils étaient au courant du caractère magnétique du fer.

→ Premier monument mentionnant l'existence d'aimants: écrivain chinois Guan Zhong (~ 650 avant J-C).

→ Les chinois appellent les aimants "pierres tendres" car elles attirent les métaux ferreux, par analogie avec la tendresse d'une mère à son enfant.

→ Origine du mot "magnétisme": les grecs extraisaient les aimants d'un gisement situé sur un mont proche d'une ville qui s'appelait "Magnesia ad Sipylum" (en Asie Mineure).

→ Première boussole: autour de l'an 0 en Chine. "Cet outil ressemble à une cuillère, et quand on la pose sur un plateau par terre, la pointe pointe vers le sud."

→ Fin de XVIII^e: on connaît les notions de pôles, que les aimants peuvent s'attirer et qu'il est possible d'aimanter du fer avec un aimant.

→ 1735: Coulomb met en évidence une interaction en $1/r^2$ entre 2 aimants.

→ "Dans la gaine": Poisson introduit la notion de champ magnétique.

→ 1820: Oersted montre qu'un fil parcouru par un courant crée un champ B.

→ 1821: Faraday découvre le phénomène d'induction et construit la première dynamo.

→ 1864: Equations de Maxwell.

→ Fin XIX^e, début XX^e: P. Curie introduit les notions de dia, para et ferro magnétisme. Langevin introduit les notions de magnétisme induit et permanent. Weiss introduit la notion de champ moléculaire.

- 1922 : Expérience de Stern et Gerlach, existence des spins.
- 1924 : Heisenberg montre que le magnétisme est d'origine quantique (couplage entre spins voisins).

- 1911 : Onnes observe la supraconductivité du mercure.
- 1986 : découverte de supra à "haute" température critique (~100 K)

Ordres de grandeurs :

Source = cerveau humain ; champ mesuré à la surface du crâne	$B \simeq 10^{-15}$ T
Champ typique dans le vide interstellaire, mesuré par une sonde spatiale	$B \simeq 10^{-6}$ T
Source = Terre ; champ mesuré à la surface ^{1,2}	$B = 4,7 \cdot 10^{-5}$ T $\simeq 0,5$ G
Source = fil rectiligne infini dans le vide parcouru par un courant de $I = 10$ A ; champ mesuré à une distance $r = 2$ cm du fil (les lignes du champ sont alors circulaires centrées sur le fil)	$B = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} = 10^{-4}$ T
Source = aimant permanent ; champ mesuré à quelques millimètres de sa surface	$B \simeq 0,1$ à 1 T
Source = électro-aimant à bobinage ; champ mesuré à l'intérieur	$B \simeq 10$ à 100 T
Source = magnétar, un type d'étoile à neutrons	$B \simeq 10^{11}$ T

Champs magnétiques intenses [modifier | modifier le code]

Fabrication [modifier | modifier le code]

La fabrication de champs magnétiques intenses (supérieurs à 1 T) nécessite l'emploi d'un électro-aimant constitué d'un bobinage de fil conducteur appelé solénoïde parcouru par un courant électrique.

Problèmes rencontrés [modifier | modifier le code]

Le dispositif de l'électro-aimant est sujet à deux limitations :

- l'effet Joule, qui tend à faire fondre les fils du bobinage lorsque l'énergie à dissiper sous forme de chaleur devient trop grande pour le matériau ;
- la « pression magnétique », action mécanique sur le bobinage résultante des forces de Lorentz sur les fils. Cette pression magnétique radiale est dirigée vers l'extérieur de la bobine et tend à faire éclater celle-ci.

Solutions techniques [modifier | modifier le code]

- Pour contrer l'effet Joule, deux possibilités sont utilisées :
 - l'utilisation d'un matériau supraconducteur sous sa température critique. Cette possibilité est limitée, car il existe un champ magnétique critique au-dessus duquel la supraconductivité du matériau disparaît.
 - le refroidissement liquide du bobinage pour évacuer l'excédent d'énergie Joule. Un débit typique de 300 litres d'eau par seconde permet d'atteindre une trentaine de teslas...
- Pour contrer la pression magnétique, il faut utiliser un conducteur plus solide que le cuivre et construire des renforts mécaniques extérieurs au bobinage.

Ordre de grandeurs [modifier | modifier le code]

Champs statiques	
Source = électro-aimant de Faraday (1840)	$B \simeq 1$ T
Source = électro-aimant de 50 tonnes installé au laboratoire Bellevue (début du ^{xx} e siècle), consommant une puissance de 100 kW	$B \simeq 7$ T
Source = électro-aimant à bobinage supraconducteur (début du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 20$ T
Source = électro-aimant à refroidissement liquide (début du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 33$ T
Source = électro-aimant hybride (supraconducteur + refroidissement liquide - début du ^{xx} e siècle) consommant une puissance de 20 MW	$B \simeq 45$ T

Il n'est guère possible de faire mieux actuellement (le record obtenu en 2019 est de 45,5 T³). Pour aller plus haut, on utilise un courant *transitoire*, qui ne circule que pendant une brève durée, de façon à laisser le bobinage refroidir ensuite. On fabrique ainsi des champs dit *pulsés*.

Champs pulsés sans destruction de la source	
Source = électro-aimant monolithique renforcé (début du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 60$ T pendant 100 ms
Source = bobines gigognes (22 juin 2011 - record du monde ⁴)	$B \simeq 91,4$ T pendant quelques ms
Champs pulsés avec destruction de la source	
Source = bobine monospire (début du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 300$ T
Source = générateur à compression de flux électromagnétique : striction axiale par forces électromagnétiques (début du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 600$ T
Source = <u>générateur magnéto-cumulatif</u> : électro-aimant + confinement magnétique des lignes de champ par explosif (milieu du ^{xx} e siècle)	$B \simeq 2000$ T

II) Dipôles magnétiques.

[2]

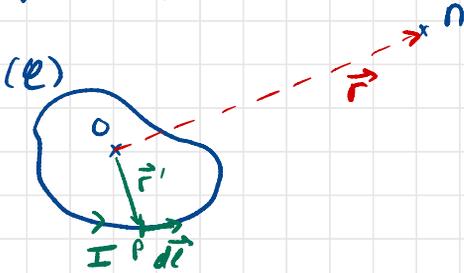
1) Définition.

Dipôle magnétique: distribution de courants contenue dans un volume V , d'extension spatiale typique a et observée à une distance $r \gg a$.

Moment magnétique:

$$\vec{J}_0 = \iiint_V \frac{1}{2} (\vec{r}' \wedge \vec{j}(\vec{r}')) d^3\vec{r}'$$

En pratique, on se restreint à une boucle de courant filiforme parcourue par un courant I .



On peut écrire $\vec{J}_0 = I \vec{S}$ avec $\vec{S} = \iint_{\Sigma} d\vec{S}$

2) Champ magnétique.

Potentiel vecteur:

$$\vec{A}(n) = \frac{\mu_0}{4\pi} \iiint_V \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Sigma} \frac{I d\vec{e}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

circuit filiforme.

$$\Rightarrow \vec{A}(n) \cdot \vec{e}_z = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Sigma} \frac{I \vec{e}_z}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot d\vec{e} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Sigma} \underbrace{\text{rot}_{\vec{r}'} \left(\frac{I \vec{e}_z}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)}_{\text{Stokes}} \cdot d\vec{S}$$

$$\text{Or } \text{rot}_{\vec{r}'} (f(\vec{r}') \cdot \vec{a}) = f(\vec{r}') \cdot \text{rot}(\vec{a}) + \underbrace{\text{grad}_{\vec{r}'}(f(\vec{r}')) \wedge \vec{a}}_{= \vec{0} \text{ pour un champ uniforme.}}$$

$$\begin{aligned} \text{Ainsi: } \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{e}_z &= \frac{\mu_0}{4\pi} I \iint_{\Sigma} \left(\text{grad}_{\vec{r}'} \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \wedge \vec{e}_z \right) d\vec{S} \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} I \iint_{\Sigma} \left[\left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \wedge \vec{e}_z \right) \right] d\vec{S} \end{aligned}$$

$$\text{Or: approximation de plaie} \Rightarrow \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = \frac{\vec{r}}{r^3} = \frac{\vec{u}_r}{r^2}$$

$$\text{Donc } \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{e}_z = \frac{\mu_0}{4\pi} I \iint_{\Sigma} \left(\frac{\vec{u}_r}{r^2} \wedge \vec{e}_z \right) d\vec{S}$$

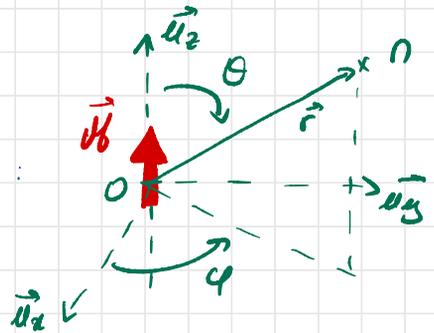
$$\begin{aligned} (\vec{u}_r \wedge \vec{e}_z) \cdot d\vec{S} \\ = (d\vec{S} \wedge \vec{u}_r) \cdot \vec{e}_z \end{aligned} \rightarrow = \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\left(I \iint_{\Sigma} d\vec{S} \right) \wedge \vec{u}_r}{r^2} \right) \cdot \vec{e}_z$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{J}_B \wedge \vec{u}_r}{r^2}}$$

Le champ magnétique est alors donné par $\vec{B}(\vec{r}) = \text{rot}(\vec{A}(\vec{r}))$

$$\Rightarrow \vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \text{rot} \left(\frac{\vec{J}_B \wedge \vec{u}_r}{r^2} \right)$$

On se place en coordonnées sphériques :



$$\vec{J}_B \wedge \vec{u}_r = J_B \sin \theta \vec{u}_\phi$$

$$\Rightarrow \vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0 J_B}{4\pi} \text{rot} \left(\frac{\sin \theta}{r^2} \vec{u}_\phi \right)$$

$$\text{Gr } \vec{\text{rot}} \left(\frac{\sin\theta}{r^2} \vec{u}_\varphi \right) = \frac{\sin\theta}{r^2} \vec{\text{rot}}(\vec{u}_\varphi) + \vec{\text{grad}} \left(\frac{\sin\theta}{r^2} \right) \wedge \vec{u}_\varphi$$

$$\bullet \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\vec{u}_\varphi}{r \sin\theta} = \frac{1}{r^3} \begin{vmatrix} \cos\theta \\ -\sin\theta \\ 0 \end{vmatrix}$$

$$\bullet \frac{\partial}{\partial r} \begin{vmatrix} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{vmatrix} \frac{\sin\theta}{r^2} \wedge \vec{u}_\varphi = \begin{vmatrix} -\frac{2\sin\theta}{r^3} \\ \frac{\cos\theta}{r^3} \\ 0 \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\cos\theta}{r^3} \\ +\frac{2\sin\theta}{r^3} \\ 0 \end{vmatrix}$$

Finalement

$$\vec{B}(r) = \frac{\mu_0 I b}{4\pi r^3} \begin{vmatrix} 2\cos\theta \\ \sin\theta \\ 0 \end{vmatrix}$$

Remarque: Analogie avec le dipôle électrostatique.

Potentiel d'un D.E.S : $V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{D} \cdot \vec{ur}}{r^2}$

↕ Analogie

Pour un dipôle magnétique : $V^*(r) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{D} \cdot \vec{ur}}{r^2}$

On retrouve la bonne expression du champ \vec{B} :

$$\vec{E}(r) = -\vec{\text{grad}}(V(r)) \leftrightarrow \vec{B}(r) = -\vec{\text{grad}}(V^*(r))$$

$$\begin{aligned}
 \text{On a donc } \vec{B}(r) &= -\text{grad} \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{J} \cdot \vec{u}_r}{r^2} \right) \\
 &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[(\vec{J} \cdot \vec{r}) \text{grad} \left(\frac{1}{r^3} \right) + \frac{1}{r^3} \cdot \text{grad} (\vec{J} \cdot \vec{r}) \right] \\
 &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[(\vec{J} \cdot \vec{r}) \left(-\frac{3\vec{u}_r}{r^4} \right) + \frac{1}{r^3} \vec{J} \right]
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \vec{B}(r) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(3(\vec{J} \cdot \vec{u}_r) \vec{u}_r - \vec{J} \right)$$

≡ Formule intrinsèque.

• Lignes de champ: En un point P donné, la tangente $d\vec{l}$ à la ligne de champ doit être colinéaire au champ $\vec{B}(P)$.

$$\Rightarrow \vec{B}(P) \wedge d\vec{l} = \vec{0}$$

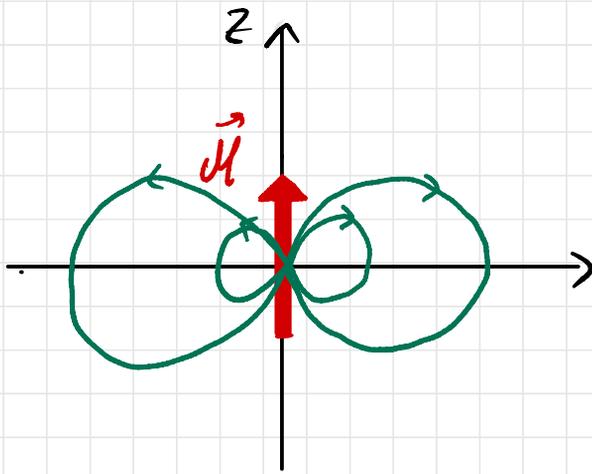
$$\Rightarrow \begin{vmatrix} B_r & \\ B_\theta & \\ 0 & \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} dr \\ r d\theta \\ r \sin\theta d\varphi \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow B_r \times r d\theta - B_\theta dr = 0 \text{ d'où } \frac{dr}{B_r} = \frac{r d\theta}{B_\theta}$$

$$\text{Avec } B_r = \frac{\mu_0 J \cdot 2 \cos\theta}{4\pi r^3} \text{ et } B_\theta = \frac{\mu_0 J \cdot \sin\theta}{4\pi r^3}$$

$$\Rightarrow \frac{dr}{r} = \frac{2 \cos\theta d\theta}{\sin\theta} \Rightarrow \ln(r) = 2 \ln(|\sin\theta|) + C \text{ etc}$$

$$\Rightarrow r(\theta) = r_0 \sin^2(\theta)$$



3) Force et moment subie par un dipôle.

Si on place une densité de courant \vec{j} dans un champ magnétique \vec{B} , la force et le moment qui s'exercent sur la distribution sont :

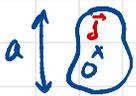
$$\vec{F} = \iiint_V \vec{j}(\vec{r}') \wedge \vec{B}(\vec{r}') d^3r'$$

$$\vec{\Gamma} = \iiint_V \vec{r}' \wedge (\vec{j}(\vec{r}') \wedge \vec{B}(\vec{r}')) d^3r'$$

On considère un dipôle magnétique correspondant à une distribution de courant \vec{j} , d'extension spatiale typique a .

On suppose que le champ varie peu à l'échelle de la distribution.

On peut faire un dével de Taylor :



$$\vec{B}(\vec{r}') = \vec{B}(0) + \begin{cases} \vec{r}' \cdot \text{grad } B_x |_0 \\ \vec{r}' \cdot \text{grad } B_y |_0 \\ \vec{r}' \cdot \text{grad } B_z |_0 \end{cases} + \dots$$

Si on injecte cette expression dans l'expression de la force exercée par une \mathcal{D} , on obtient (pour la i ème composante) :

$$F_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} [B_k(0) \iiint_V j_j(\vec{r}') d^3\vec{r}' + \iiint_V j_j(\vec{r}') \vec{r}' \cdot \text{grad } B_k|_0 d^3\vec{r}']$$

Rappel: Le produit vectoriel $\vec{A} = \vec{B} \wedge \vec{C}$ s'écrit: $A_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} B_j C_k$

avec $\epsilon_{ijk} = 1$ pour $i=1, j=2, k=3$ et pour toute autre permutation circulaire, $\epsilon_{ijk} = -1$ pour toute autre permutation, et $\epsilon_{ijk} = 0$ dès que 2 indices au moins sont égaux.

Or, pour une distribution de courants stationnaires, contenue dans un volume V délimité par une surface fermée, on a :

$$\begin{aligned} \iiint_V \vec{j} \cdot \vec{e}_x d\tau &= \iiint_V [\text{div}(x\vec{j}) - x \text{div}(\vec{j})] d\tau \\ &= \iiint_V x \vec{j} \cdot \vec{n} dS \end{aligned}$$

$= 0$ en régime permanent.

$$= 0 \quad \text{car } \vec{j} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur la surface (sinon ça sort).}$$

$$\Rightarrow \boxed{\iiint_V \vec{j} d\tau = 0} \quad \text{en Régime permanent.}$$

Et le terme monopolaire est nul.

$$\begin{aligned} \text{Ainsi: } F_i &= \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \iiint_V j_j(\vec{r}') \vec{r}' \cdot \text{grad } B_k|_0 d^3\vec{r}' \\ (*) \quad &= \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} (\nabla \wedge \text{grad})_j B_k(0) d^3\vec{r}' \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \vec{F} = (\vec{M} \wedge \text{grad}) \wedge \vec{B}(0)$$

$$= \text{grad}(\vec{M} \cdot \vec{B})|_0 - \underbrace{\text{div} \vec{B}}_{=0} \cdot \vec{M}$$

$$\Rightarrow \vec{F} = \text{grad}(\vec{M} \cdot \vec{B})|_0 = (\vec{M} \cdot \text{grad})_0 \vec{B}$$

dipôle rigide

Avec une démo du même type, on arrive à $\vec{\Gamma}_0 = \vec{M} \wedge \vec{B}(0)$

\Rightarrow Un dipôle magnétique s'aligne dans la direction du champ et est attiré par les zones de champ fort.

4) Énergie potentielle.

On se contente de l'analogie avec le dipôle ES : $E_p = -\vec{M} \cdot \vec{B}$

5) Analogie avec le dipôle ES.

Loi	Électrostatique	Magnétisme
Énergie potentielle d'un dipôle dans un champ	$E_p = -\vec{p} \cdot \vec{E}$	$E_p = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$
Couple exercé sur un dipôle par un champ	$\vec{\Gamma} = \vec{p} \wedge \vec{E}$	$\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}$
Force exercée sur un dipôle par un champ	Si $\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = \vec{0}$: $\vec{F} = -\vec{\nabla} E_p = \vec{\nabla}(\vec{p} \cdot \vec{E})$ Sinon : $\vec{F} = (\vec{p} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}$	$\vec{F} = -\vec{\nabla} E_p = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$
Champ créé par un dipôle	$\vec{E} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3(\vec{p} \cdot \vec{u})\vec{u} - \vec{p}}{r^3}$	$\vec{B} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \frac{3(\vec{\mu} \cdot \vec{u})\vec{u} - \vec{\mu}}{r^3}$
Énergie potentielle d'interaction de deux dipôles	$E_p = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3(\vec{p}_1 \cdot \vec{u})(\vec{p}_2 \cdot \vec{u}) - \vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2}{r^3}$	$E_p = - \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \frac{3(\vec{\mu}_1 \cdot \vec{u})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{u}) - \vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2}{r^3}$

~~Chapitre 8~~

III) L'expérience de Stern et Gerlach

1922

*Les choses capitales qui ont été dites à l'humanité
ont toujours été des choses simples.*

Charles de Gaulle

Nous abordons maintenant l'expérience de Stern et Gerlach. Nous allons montrer, sur cet exemple d'une situation expérimentale hautement « non classique », comment on peut construire phénoménologiquement l'espace des états et les observables pertinentes. La description ainsi mise en place fournira une illustration concrète d'un processus de mesure en mécanique quantique.

1 Le principe de l'expérience

On envoie un jet d'atomes de vitesse bien définie dans une zone où règne un champ magnétique inhomogène dirigé suivant une direction z orthogonale à la vitesse initiale des atomes (figure 8.1a). On mesure la déviation éventuelle des atomes par ce gradient de champ magnétique en regardant l'impact des atomes sur un écran orthogonal à la direction initiale du jet atomique.

1.1 Analyse classique

Raisonnons d'abord dans le cadre de la mécanique classique. Les atomes sont neutres ; ils ne sont donc pas soumis à la force de Lorentz. En revanche, s'ils portent un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$, ils ressentent, à l'intérieur de la zone où règne le gradient de champ magnétique, une force parallèle à z :

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} . \quad (8.1)$$

L'expression (8.1) est un résultat bien connu de mécanique classique et de magnétostatique. Rappelons sa démonstration. Quand un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ est placé dans un champ magnétique \boldsymbol{B} , l'énergie d'interaction s'écrit :

$$W = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} , \quad (8.2)$$

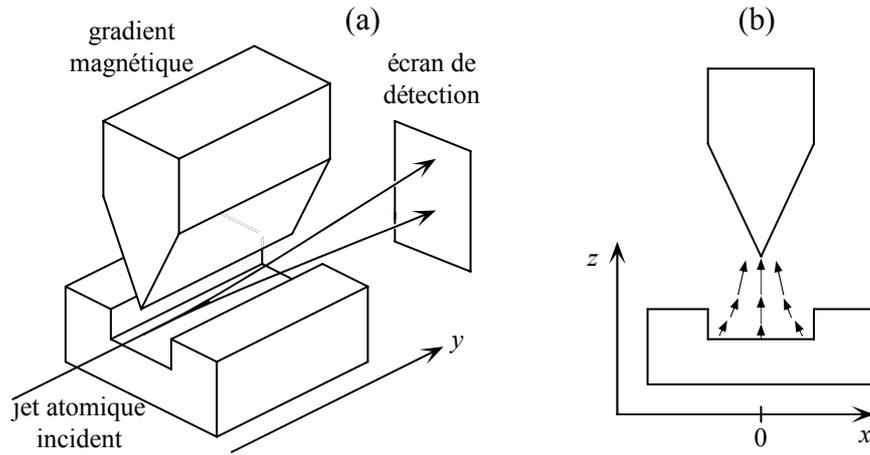


FIG. 8.1: (a) Expérience de Stern et Gerlach ; un jet d'atomes d'argent issus d'un four se clive en deux faisceaux lorsqu'il traverse une zone où règne un gradient de champ magnétique. Cette expérience peut être considérée comme une mesure de la composante du moment magnétique atomique suivant la direction du champ magnétique (z sur la figure). (b) Gradient magnétique entre les pièces polaires de l'aimant.

et le couple :

$$\Gamma = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \quad (8.3)$$

s'exerce sur le moment magnétique. De plus, si le champ magnétique est inhomogène, le moment magnétique est soumis à une force :

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \sum_{i=x,y,z} \mu_i(t) \nabla B_i. \quad (8.4)$$

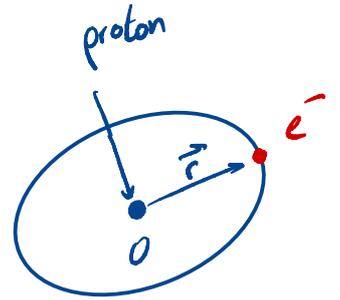
Nous pouvons faire un modèle classique pour un atome (l'atome d'hydrogène pour simplifier) en considérant une particule de masse m_e et de charge $-q$ (l'électron), en rotation uniforme à la vitesse v sur un cercle de rayon r centré sur une charge $+q$. Cette charge fixe représente le noyau et est supposée beaucoup plus lourde que l'électron. Le moment cinétique de ce système par rapport au centre de l'orbite électronique est :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m_e r v \mathbf{u}, \quad (8.5)$$

où \mathbf{u} est le vecteur unitaire perpendiculaire au plan de la trajectoire de l'électron. Le moment magnétique de cette boucle de courant élémentaire s'écrit :

$$\boldsymbol{\mu} = I S \mathbf{u}, \quad (8.6)$$

où $I = -qv/(2\pi r)$ est l'intensité dans la boucle et $S = \pi r^2$ l'aire de cette boucle. Nous trouvons donc une relation remarquablement simple entre le



⚠ Il s'agit d'un courant magnétique sur une période.

moment cinétique et le moment magnétique de ce système classique :

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma_0 \mathbf{L} \quad \text{avec} \quad \gamma_0 = \frac{-q}{2m_e} \quad (8.7)$$

Notons que le coefficient de proportionnalité γ_0 , appelé rapport gyromagnétique, ne dépend pas du rayon r de la trajectoire de l'électron, ni de sa vitesse v . En principe, la présence d'un champ magnétique extérieur perturbe l'orbite électronique et modifie cette relation très simple, mais on peut montrer que cette perturbation est très faible pour les champs réalisables en pratique, et nous la négligerons.

A partir de (8.3), on pourrait s'attendre naïvement à ce que le moment magnétique s'aligne avec le champ magnétique local, comme l'aiguille aimantée d'une boussole. Mais la relation de proportionnalité entre moment cinétique et moment magnétique donne naissance à un comportement radicalement différent, conséquence d'un effet gyroscopique. L'évolution du moment cinétique est donnée par $d\mathbf{L}/dt = \boldsymbol{\Gamma}$. La proportionnalité entre \mathbf{L} et $\boldsymbol{\mu}$ entraîne donc :

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = -\gamma_0 \mathbf{B} \times \boldsymbol{\mu} \quad (8.8)$$

Par conséquent, pour un atome en \mathbf{r} , le moment magnétique ne s'aligne pas avec le champ local $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, mais précesse autour de cet axe avec la pulsation :

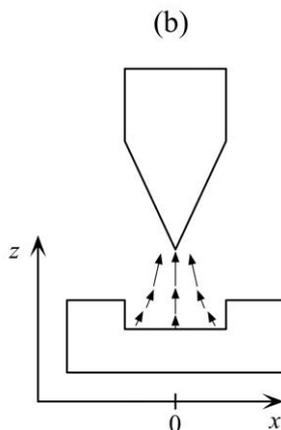
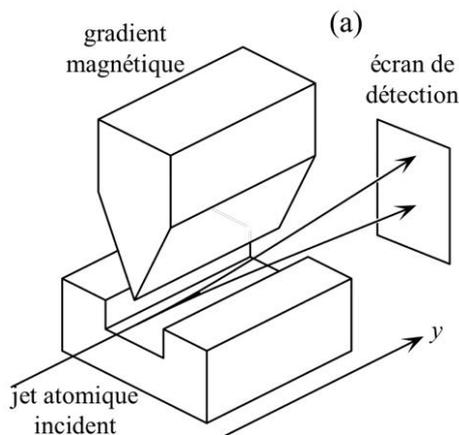
$$\omega_0 = -\gamma_0 B(\mathbf{r}) \quad (8.9)$$

La quantité ω_0 est appelée pulsation de Larmor.

Ce phénomène de précession joue un rôle important en pratique. C'est un cas particulier d'un théorème général¹ de l'électrodynamique prouvé par Larmor en 1897. Ce problème fut étudié de manière indépendante par H.A. Lorentz la même année.

Supposons que la trajectoire classique des atomes se trouve dans le plan de symétrie $x = 0$ de l'aimant (figure 8.1b). Le long de cette trajectoire, le champ magnétique est toujours parallèle à l'axe z , et la précession de Larmor se fait autour de cet axe. De plus, en raison de la symétrie du dispositif, les quantités $\partial B_z / \partial x$ et $\partial B_z / \partial y$ s'annulent le long de la trajectoire atomique (nous négligeons de possibles effets de bord). Si le déplacement du moment magnétique pendant une période de précession $2\pi / \omega_0$ est petit devant l'échelle de variation spatiale de $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, nous pouvons moyenner la force (8.4) sur une période de Larmor. Les contributions de μ_x et μ_y à (8.4) s'annulent, et il ne reste plus que la composante de la force le long de l'axe z : $F_z = \mu_z(t) \partial B_z / \partial z$. De plus, nous déduisons de (8.8) que μ_z reste constant quand l'atome bouge dans le champ magnétique, ce qui justifie finalement le résultat (8.1).

¹voir par exemple J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, chap. 5 (Wiley, 1975).



$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Remarque : forme du champ magnétique :

9.6.12 Étude de l'expérience de Stern-Gerlach

1. Comme le plan yOz est un plan de symétrie, B_z doit être une fonction paire de x et on doit avoir

$$\left. \frac{\partial B_z}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$$

Par invariance par translation le long de Oy

$$\left. \frac{\partial B_z}{\partial y} \right|_{x=0} = 0$$

Les deux composantes non nulles du champ magnétique sont, au voisinage de $x = 0$

$$\cancel{B_x = -bx} \quad B_z = B_0 + bx$$

Ce champ vérifie bien les deux équations de Maxwell (1.8) et (1.9) dans le vide $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ et

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = \cancel{-b} + b = 0 \Rightarrow \underline{a = -b}$$

L'énergie potentielle est

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_x B_x - \mu_z B_z = b\mu_x x - b\mu_z z$$

d'où la force \vec{F} de composantes

$$F_x = \frac{\partial(-\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial x} = b\mu_x \quad F_z = \frac{\partial(-\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial z} = -b\mu_z$$

Le terme $B_0 \hat{z}$ du champ magnétique entraîne une précession de Larmor du spin autour de l'axe Oz (§ 3.2.5) où μ_z reste constant. En revanche, en raison de cette précession, la valeur moyenne de μ_x est nulle : $\langle \mu_x \rangle = 0$, et la force suivant Ox se moyenne à zéro si le temps de transit est $\gg 1/\omega$, car le spin effectue un grand nombre de révolutions autour de Oz .

On doit avoir $L \gg \frac{1}{\omega_0} = -\frac{1}{2\mu_B}$

2. La force sur le moment magnétique est verticale et constante; elle vaut $F = \pm \mu b$ pour un spin orienté suivant $\pm \hat{z}$. L'écart entre les trajectoires d'un spin orienté vers le haut et d'un spin orienté vers le bas à la sortie de l'entrefer est donc

$$\delta = 2 \frac{1}{2} \frac{F}{m} t^2 = \frac{F}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2 = \frac{\mu b}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2$$

Évaluons aussi le produit $\Delta z \Delta p_z$

$$\Delta z \Delta p_z \sim (10^{-4}) (1.8 \times 10^{-25}) (10) = 1.8 \times 10^{-28} \text{ MKSA} \sim 10^6 \hbar$$

La description par des trajectoires classiques est bien légitime.

2. Données numériques. Les atomes d'argent de masse $m = 1.8 \times 10^{-27} \text{ kg}$ sortent du four avec une vitesse $v \approx 500 \text{ m.s}^{-1}$ et une dispersion des vitesses $\Delta v \sim 10 \text{ m.s}^{-1}$. Les fentes collimatrices ont une hauteur $\Delta z = 10^{-4} \text{ m}$, la longueur de l'entrefer est $L = 5 \times 10^{-2} \text{ m}$, le champ magnétique $B_0 = 1 \text{ T}$ et $b = 10^4 \text{ T.m}^{-1}$. Montrer que l'écart δ entre les deux trajectoires correspondant à $S_z = \hbar/2$ et $S_z = -\hbar/2$ à la sortie de l'entrefer vaut

$$\delta = \frac{\mu b}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2$$

Évaluer numériquement δ . Calculer le produit $\Delta z \Delta p_z$ et montrer que $\Delta z \Delta p_z \gg \hbar$. On peut donc traiter les trajectoires des atomes de façon classique.

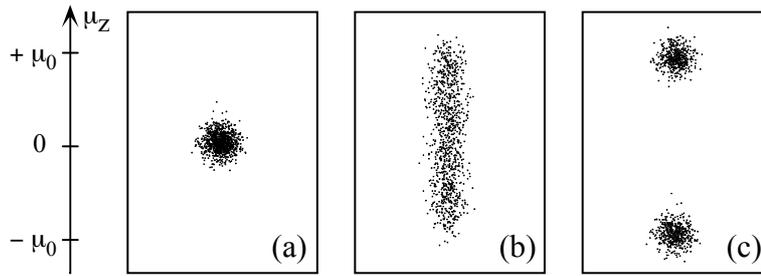


FIG. 8.2: Résultats possibles d'une expérience de Stern et Gerlach. (a) En absence de gradient magnétique, aucune déflexion des trajectoires atomiques ne se produit et les atomes forment une tache unique autour du point $x = z = 0$; chaque point représente l'impact d'un atome sur l'écran de détection. (b) Simulation du résultat attendu classiquement, en supposant que tous les atomes portent le même moment magnétique μ_0 avec une orientation aléatoire; la distribution de la composante selon z du moment magnétique est alors uniforme entre $-\mu_0$ et $+\mu_0$. (c) Simulation du résultat trouvé expérimentalement avec des atomes d'argent : l'expérience, qui peut être considérée comme une mesure de la composante selon z du moment magnétique, n'admet que deux résultats $\mu_z = \pm\mu_0$.

1.2 Résultats expérimentaux

En l'absence de gradient de champ magnétique, on observe une tache unique sur l'écran de détection, au voisinage de $x = z = 0$ (figure 8.2a). Le gradient de champ magnétique permet la mesure de la composante selon z d'un éventuel moment magnétique des atomes. Supposons que les atomes portent tous un moment magnétique de norme μ_0 , et faisons l'hypothèse (raisonnable) que ces moments ont une direction aléatoire quand les atomes entrent dans la zone de champ magnétique. On s'attend alors à ce que les points d'impact sur l'écran forment un segment parallèle à z (figure 8.2b). Les deux extrémités du segment correspondent aux atomes dont les moments magnétiques sont orientés tels que $\mu_z = \pm\mu_0$.

Le résultat trouvé expérimentalement diffère radicalement de cette prédiction classique. L'ensemble des impacts ne forme jamais un segment sur l'écran. Pour certains atomes comme l'argent, ces impacts se groupent en deux taches, correspondant à $\mu_z = +\mu_0$ et $\mu_z = -\mu_0$, avec $\mu_0 = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$ (figure 8.2c). Pour d'autres types d'atomes, on trouve trois, quatre,... taches, toujours disposées symétriquement par rapport à la trajectoire obtenue en l'absence de champ magnétique. Certains atomes, comme l'hélium dans son état fondamental, ne donnent lieu à aucune déviation mesurable. Ce cas est facilement interprétable : ces atomes ne possèdent pas de moment magnétique. Dans le paragraphe suivant, nous allons chercher comment le formalisme quantique permet de décrire l'ensemble de ces résultats, en nous attachant tout particulièrement à la situation des deux taches, rencontrée dans le cas d'atomes

d'argent. Notre méthode se généralise à 3,4,... taches.

Pour terminer cette présentation, remarquons que l'ordre de grandeur de μ_0 est quant à lui interprétable. En effet, la seule quantité homogène à un moment magnétique que l'on peut fabriquer à partir des constantes fondamentales est $\hbar q/m$ où q désigne la charge élémentaire (proton ou électron) et m une masse typique de particule atomique. Suivant que l'on choisit pour m la masse m_e de l'électron ou la masse m_p du proton, on obtient des résultats différant par 3 ordres de grandeur allant de 10^{-23} à 10^{-26} J T⁻¹. Le résultat μ_0 de l'expérience de Stern et Gerlach est compatible avec :

$$\mu_0 = \hbar |\gamma_0| = \frac{\hbar q}{2m_e}, \quad (8.10)$$

ce qui revient à prendre $L \equiv \hbar$ dans (8.7). La quantité négative $\mu_B = -\hbar q/(2m_e)$ est appelée *magnéton de Bohr*.

Pourquoi Stern et son collègue Gerlach ont-ils voulu faire cette expérience en 1921, soit 5 ans avant que la mécanique quantique telle que nous la comprenons maintenant soit développée ? Le but de Stern était de tester un des aspects les plus mystérieux de la *vieille théorie des quanta*, qui était dénommé la *quantification spatiale*. Quand les théoriciens de l'époque apprirent le projet de Stern et Gerlach, la plupart d'entre eux se montrèrent sceptiques. Born déclara par la suite : « Il me fallut du temps pour prendre cette idée au sérieux. J'avais toujours pensé que la quantification spatiale était une sorte d'expression symbolique pour quelque chose qu'on ne comprenait pas. La prendre au pied de la lettre était vraiment l'idée de Stern... J'ai essayé de le convaincre que cela n'avait pas de sens, mais il m'a répondu que cela valait quand même la peine d'essayer ». L'expérience fut difficile, nécessitant à la fois un vide poussé et un four très chaud (1000 C) pour produire un jet atomique d'atomes d'argent suffisamment intense. Quand le résultat fut enfin obtenu, il fut tout d'abord considéré comme une preuve éclatante de l'idée de quantification spatiale. Mais Einstein et Ehrenfest montrèrent presque aussitôt que la description de l'expérience dans le cadre de cette vieille théorie des quanta était incohérente, et c'est uniquement quand la mécanique quantique fut développée en 1925-27 (avec le concept du spin) qu'une description théorique satisfaisante de cette expérience devint possible.

2 La description quantique du problème

cf Annexe pour la suite

La première étape de cette description quantique est de préciser l'espace des états d'un atome dans cette expérience, en déterminant les degrés de liberté de l'atome. Il y a *a priori* deux classes de degrés de liberté en jeu. Tout d'abord les atomes sont des particules mobiles dans l'espace, avec des degrés de liberté de translation suivant chacune des trois directions x , y , z . A cette classe de degrés de liberté spatiaux vient s'ajouter un autre degré de liberté qui correspond au moment magnétique interne de l'atome.

Dans le cas d'atomes d'hélium dans leur niveau fondamental, pour lesquels aucune déflexion n'est observée, le degré de liberté interne peut être ignoré ;

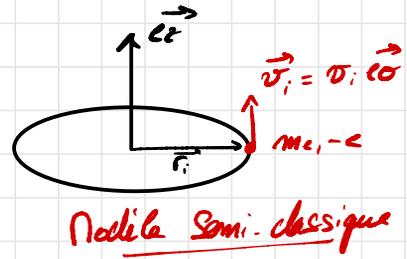
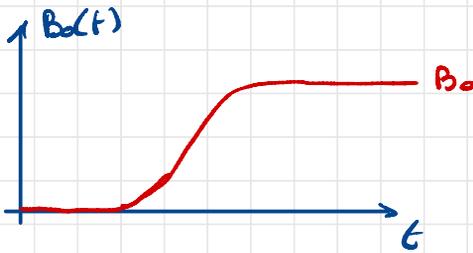
IV) Aspects microscopiques du diamagnétisme.

Le diamagnétisme est un comportement de tous les matériaux qui les conduit, en présence d'un champ \vec{B} , à créer une très faible aimantation opposée à \vec{B} ($\chi_m \approx -10^{-5}$).
L'origine du diamagnétisme est un phénomène quantique (quantification de Landau) pouvant être expliquée par la modification du moment orbital des e^- autour des noyaux.

1) Traitement semi-classique.

On considère un atome dont les électrons ne possèdent que du moment cinétique orbital: $\vec{L} = \sum_i \vec{r}_i \wedge m_e \vec{v}_i$ ($i = \text{électrons}$).

On applique le champ suivant (initialement nul):



Force de Lorentz sur $1 e^-$: $\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$.

Le champ \vec{E} créé par le proton (\vec{E}_p) est radial, il n'induit donc pas de moment sur $l'e^-$.

Une fois le champ \vec{B} établi, le moment de la partie magnétique est également nul, en effet:

$$\vec{r} \wedge (\vec{v} \wedge \vec{B}) = \vec{0}$$

L'effet est donc uniquement dû au régime transitoire, durant lequel il apparaît un champ:

$$\vec{E} = - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\text{Com a } \vec{B} \parallel \vec{e}_z \Rightarrow \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \parallel \vec{e}_z \Rightarrow \vec{E} \perp \vec{e}_z.$$

$$\uparrow$$

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\text{Com a } \oint \text{rot } \vec{E} \cdot d\vec{S} = - \oint \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{S}$$

$$\Leftrightarrow \oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = - \pi r^2 \frac{dB_0}{dt}$$

Stokes

$$\Leftrightarrow 2\pi r E(r) = - \pi r^2 \frac{dB_0}{dt}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = - \frac{1}{2} r \frac{dB_0}{dt} \vec{e}_\theta$$

Le TNC appliqué à l' e^- (ref. gel + par rapport à 0):

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{r} \wedge (-e\vec{E})$$

$$= \vec{r} \wedge \left(+ \frac{e}{2} r \frac{dB_0}{dt} \vec{e}_\theta \right)$$

$$= \frac{e r^2}{2} \frac{dB_0}{dt} \vec{e}_z$$

Finalement l'application d'un champ provoque une variation de moment cinétique:

$$\Delta \vec{l} = \frac{e}{2} r_{\perp}^2 B_0 \vec{e}_z, \quad r_{\perp}^2 = x^2 + y^2$$

\Rightarrow Il apparaît donc un moment magnétique induit:

$$\Delta \vec{m} = - \frac{e}{4 m_e} r_{\perp}^2 B_0 \vec{e}_z$$

Le moment magnétique moyen est finalement $\Delta \langle \vec{m} \rangle = - \frac{e^2}{4 m_e} \langle r_{\perp}^2 \rangle B_0 \vec{e}_z$

Ce qui permet d'obtenir l'aimantation $\vec{M} = n_a \Delta \langle \vec{m} \rangle$

$$\Rightarrow \vec{M} \approx \chi_m \frac{\vec{B}}{\mu_0}$$

avec

$$\chi_m = - \frac{n_a \mu_0 e^2 \langle r_{\perp}^2 \rangle}{6 m_e}$$

A ce stade, il nous faut une estimation du rayon moyen de l'orbite électronique, ce que la mécanique classique ne peut pas faire car il n'y a aucune contraintes sur les orbites.

On utilise donc les données provenant de la mécanique quantique, ce qui fait que ce modèle est en fait semi-classique.

Pour l'atome d'hydrogène : $\langle r_{\perp}^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2}{3} a_0^2$

Qui permet d'obtenir $\chi_m = - \frac{n_a \mu_0 e^2}{6 m_e} a_0^2$

La susceptibilité est ici bien négative, indépendante de la température (conforme à l'expérience), et proportionnelle au volume. Dans les conditions usuelles de température et de pression, pour les gaz :

Gaz (P=1 bar), $V_m=24$ L à 25 C $n_a \approx 40 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} = 2.4 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$

On trouve : $\chi_m \sim -4 \cdot 10^{-10}$

Ce qui est le bon ordre de grandeur puisque

$$\chi_m(\text{Ne}) = -0.9 \cdot 10^{-10}$$

$$\chi_m(\text{Ar}) = -2.4 \cdot 10^{-10}$$

$$\chi_m(\text{K}) = -3.5 \cdot 10^{-10}$$

$$\chi_m(\text{Xe}) = -5.4 \cdot 10^{-10}$$

On pourrait se contenter de ce résultat et imaginer que notre modèle classique est formidable. Ce serait probablement la conclusion au niveau L2. Toutefois un modèle classique se heurte à quelques Difficultés.

- La première est naturellement que nous avons utilisé un résultat de la mécanique quantique pour estimer le rayon des orbites.
- La seconde, plus fondamentale, tient au théorème de Bohr - van Leeuwen "le diamagnétisme ne peut exister sans la prise en compte des effets quantiques".

Remarque : Le rayon de l'orbite n'est pas affecté par le champ car il y a compensation en la force magnétique et la force centrifuge qui augmente due à l'oscillation

2) Théorème de Bohr - Van Leeuwen.

Énoncé: Le diamagnétisme ne peut exister sans prise en compte des effets quantiques.

Démo: Le hamiltonien du système de charges plongées dans un champ \vec{B} dérivant du potentiel vecteur \vec{A} s'écrit (cf annexe B):

$$H = \sum_i \left[\frac{(\vec{p}_i - q\vec{A})^2}{2m} + V(\{\vec{r}_i\}) \right]$$

La fonction de partition (en supposant l'énergie d'interaction entre électrons négligeable) est:

$$Z = \frac{1}{N! h^N} \int \prod_i d^3\vec{p}_i d^3\vec{r}_i e^{-\beta H}; \quad \text{avec } H_i = \frac{(\vec{p}_i - q\vec{A})^2}{2mc}$$

particules indépendantes \rightarrow

Or cette fonction de partition ne dépend pas du champ \vec{B} .

En effet, si on effectue le changement de variable: $\vec{X}_i = \vec{p}_i - q\vec{A}$, on a

$$Z = \frac{1}{N! h^N} \int \prod_i d^3\vec{X}_i d^3\vec{r}_i \exp\left(-\beta \frac{\vec{X}_i^2}{2mc}\right)$$

Puisque l'intégrale n'est pas bornée (système non relativiste), on voit que l'intégrale ne dépend pas de \vec{A} .

$$\Rightarrow Z(T, B) = Z(T, 0)$$

$$\Rightarrow F = -k_B T \ln(Z) \text{ indépendant de } B.$$

$$\Rightarrow \chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B} = 0 \Rightarrow \text{la aimantation est nulle.}$$

$$F(T, B) = U - TS - B\chi$$

\uparrow
moment dipolaire
($\chi = \frac{M}{V}$)

3) Traitement quantique.

Traitement quantique d'une particule chargée dans un champ B

On considère toujours le cas d'une particule chargée orbitant autour d'un noyau, subissant une force dérivant d'une énergie potentielle $V(r)$. L'exemple typique est celui de l'atome d'hydrogène pour lequel 1 électron orbite autour d'un proton de charge $+e$.

L'expression du hamiltonien est toujours valide (principe de correspondance)

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + V(r) \quad \vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}_0$$

Dans le cas du traitement quantique, l'énergie du système lorsque B (donc A) est non nul n'est pas la même que celle en champ nul. Pour montrer ce résultat, on peut décomposer le hamiltonien en une partie H_0 (champ $B=0$), et traiter la partie magnétique comme une perturbation. Après quelques calculs (voir Cohen Tanoudji ou équivalent), on obtient :

$$H = H_0 + H_1 + H_2$$

$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ Hydrogène

$H_1 = -\frac{q}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B}_0$ Effet Zeeman Paramagnétisme

$H_2 = \frac{q^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2)$ Diamagnétisme de Landau

(c'est le moment total (= \vec{J})).
← Indépendant de \vec{L} , de \vec{S} .
cf. après.

qui fait apparaître un terme H_1 proportionnel à B, donnant une correction à l'énergie si le moment cinétique est de moyenne non nulle, et un terme H_2 faisant apparaître à nouveau le carré du rayon de l'orbite.

On peut calculer les corrections $\langle H_1 \rangle$ et $\langle H_2 \rangle$

Dans le cas de l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène, on a :

$\langle \psi_0 | L_z | \psi_0 \rangle = 0$ Le moment cinétique moyenné (symétrie radiale)

Le déplacement d'énergie est $\Delta E = \frac{e^2 B^2}{8m_e} \langle \psi_0 | r_{\perp}^2 | \psi_0 \rangle = \frac{e^2 B^2 a_0^2}{12m_e}$

Dont on tire l'énergie libre $F(T, B) = F_0(T) + N \frac{e^2 B^2 a_0^2}{12m_e}$

Et l'aimantation $M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{N e^2 \mu_0 a_0^2}{V 6m_e \mu_0} B$

On obtient alors le même résultat que pour le modèle semi-classique. Il faut noter que c'est un coup de chance que le 1er modèle donne le bon résultat.

V) Aspects microscopiques du paramagnétisme.

[3]

Le mécanisme concerne les atomes dont les électrons possèdent un moment magnétique permanent. Il décrit la compétition entre orientation et agitation thermique.

1) Paramagnétisme de Langevin / de Curie.

Illustrons ce mécanisme en considérant le modèle d'un système de N/V électrons par unité de volume sans interactions entre eux, en contact avec un thermostat.

L'énergie d'interaction entre un moment magnétique et le champ extérieur est de la forme :

$$U_{int} = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -m_z B$$

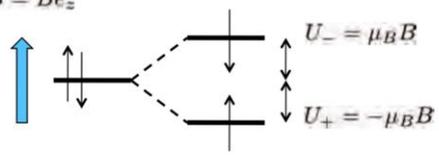
Rappel : on ne traite ici que la partie provenant de l'interaction magnétique due aux spins, en supposant les particules indépendantes. Le hamiltonien du système faisant apparaître des termes additifs indépendants, la fonction de partition se factorise et l'énergie libre apparaît comme une somme des différentes contributions.

Le hamiltonien du système est : $H = -\sum \vec{m}_i \cdot \vec{B}$

Pour un système de spin 1/2 $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ $m_z = \mp \frac{eh}{2m_e} = \mp \mu_B$

$$\vec{B} = B\vec{e}_z$$

Supposant le champ vertical, l'énergie de la configuration dépend de l'orientation du spin z



Dans le cadre de la statistique de Maxwell Boltzmann, la probabilité de chaque configuration est :

$$P_- = A \exp\left(-\frac{\mu_B B}{kT}\right) \quad P_+ = A \exp\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right)$$

On obtient A à l'aide de la condition de normalisation $P_+ + P_- = 1$

$$A = \frac{1}{2 \cosh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right)}$$

Prendre en compte \vec{L} serait compliqué car on aurait trop de niveaux d'énergie à prendre en compte dans le calcul de Q_{stat} .

Une alternative serait de traiter \vec{L} plus classiquement (sans quantification des moments magnétiques) mais bof bof.

Le moment magnétique moyen est alors

$$\langle m_z \rangle = \mu_B P_+ - \mu_B P_- = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right)$$

Pour un système de N/V électrons par unité de volume.

$$\vec{M} = \frac{N}{V} \langle m_z \rangle \vec{e}_z \quad \langle m_x \rangle = \langle m_y \rangle = 0 \quad \vec{M} = \frac{N}{V} \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right) \vec{e}_z$$

Cette relation semble fortement non linéaire, ce qui ne cadre pas avec ce que nous avons pu rapporter des paramagnétiques au début du chapitre.

La question est donc de savoir si le terme dans la fonction tanh est petit ou grand. Calculons un ODG pour un champ assez intense $B=1$ Tesla

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \sim 10^{-23} \text{ A.m}^2 \quad \frac{U_{int}}{kT} = \frac{\mu_B B}{kT} \sim 0.01$$

La réponse est donc linéaire : $\vec{M} = \frac{N}{V} \frac{\mu_0 \mu_B^2}{kT} \vec{B}$ $\chi_m = \frac{N}{V} \frac{\mu_0 \mu_B^2}{kT} > 0$

Pour un gaz ($P=1$ bar) $n_a \sim 2 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$ $\chi_m(\text{para}) \sim 10^{-6} \sim 10^4 \chi_m(\text{dia})$

Quelques remarques sur ce modèle :

- Le modèle retrouve la loi de Curie.
- Il n'y a pas de ferromagnétisme car les interactions spin-spin entre électrons sont négligées.
- Il existe un autre type de paramagnétisme, que l'on a pas décrit ici, celui des métaux qui est basé sur la statistique de Fermi-Dirac qui intègre le principe de Pauli.
- Dans le cas présent, on a considéré la statistique de Boltzmann pour décrire le spin des électrons car chaque spin/électron était supposé localisé au voisinage de son atome. Comme les fonctions d'onde ne se recouvrent pas, le principe d'exclusion ne s'applique pas.

Le paramagnétisme des atomes libres s'observe dans les substances qui possèdent des atomes magnétiques et où les distances entre ces atomes sont suffisamment grandes pour qu'ils n'interagissent pas entre eux. Les substances qui satisfont à ces conditions sont les suivantes :

- ♦ les gaz d'atomes ou molécules magnétiques,
- ♦ les sels d'éléments de transition et de terres rares tels que ceux dont le comportement est évoqué ci-dessus,
- ♦ certains oxydes de terres rares.

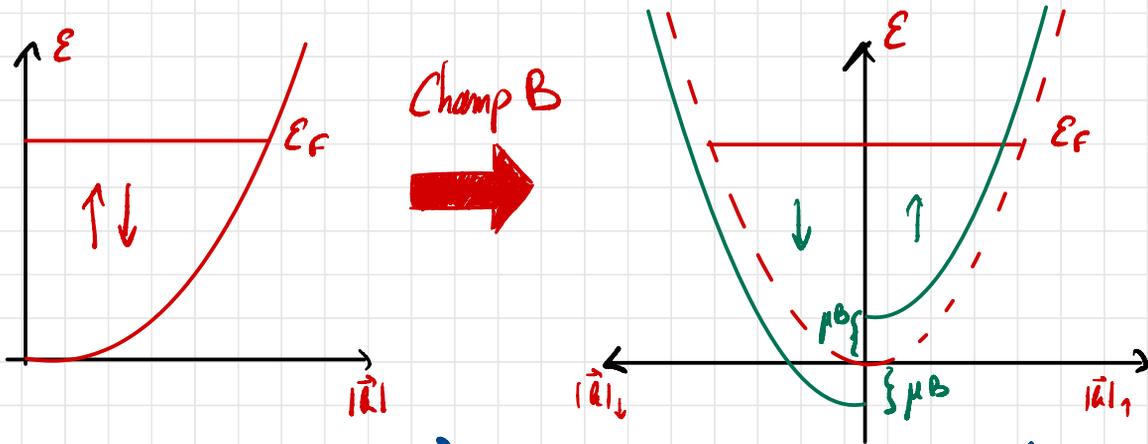
On désigne par substances paramagnétiques seulement celles qui présentent un tel comportement jusqu'aux très basses températures. Nous verrons plus loin que tous les matériaux qui s'ordonnent magnétiquement (ferro-, ferri-, antiferromagnétiques...) se comportent comme des paramagnétiques au-dessus d'une température critique.

Pour un moment $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ quelconque on aurait une fonction de Brillouin de J à la place de $\frac{1}{2}$ tangente.

2) Paramagnétisme de Pauli.

Dans le cas des métaux, il faut prendre en compte le principe de Pauli et utiliser la statistique de Fermi-Dirac.

Dans le cadre du modèle de Sommerfeld on a la répartition suivante des e^- :



En présence d'un champ \vec{B} , les niveaux de Fermi des spins \uparrow et \downarrow se trouvent décalés par "l'énergie Zeeman" $\pm \mu_B B$.

L'équilibre thermo requiert que le potentiel chimique (ie l'énergie de Fermi) des 2 spins soit le même: c'est le cas des bandes que

\uparrow et \downarrow sont donc respectivement:

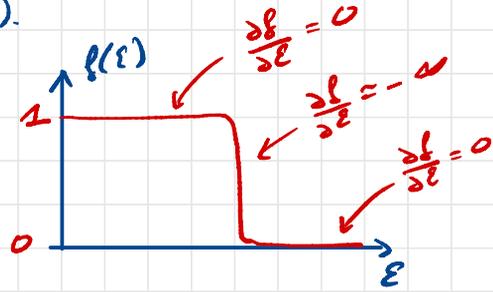
$$\begin{aligned}
 N_{\pm} &= \frac{1}{2} \int_{\pm \mu_B B}^{\infty} dE g(E) m(E) \\
 &\approx \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE g(E \mp \mu_B B) m(E) \\
 &\approx \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE \left[g(E) \mp \mu_B B \frac{\partial}{\partial E} g(E) m(E) \right]
 \end{aligned}$$

L'écart des phases ne dépend que de l'énergie cinétique, pas de l'NRS totale puisqu'on repère une particule par sa position et par sa quantité de moment.

$$\approx \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE f(E) m(E) \mp \frac{\mu_0 B}{2} \int_0^{\infty} dE \frac{\partial f}{\partial E}(E) m(E)$$

$$= \frac{N}{2} \mp \frac{\mu_0 B}{2} \int_0^{\infty} dE \frac{\partial f}{\partial E}(E) m(E)$$

$$\text{Or } \frac{\partial f}{\partial E}(E) \approx - \underset{\uparrow \text{dirac}}{\delta(E - E_F)}$$



$$\Rightarrow N_{\pm} \approx \frac{1}{2} N \pm \frac{\mu_0 B}{2} m(E_F)$$

$$\text{Ainsi } N = \mu_B N_+ - \mu_B N_- = m(E_F) \mu_0^2 B$$

$$\Rightarrow \chi_p = \frac{N}{\mu_0} \text{ avec } \chi_p = \mu_0 \mu_B^2 m(E_F)$$

$$\text{Pour un gaz de Fermi 3D, } m(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$$

$$\Rightarrow \chi_p = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 \mu_B^2 N}{E_F}$$

μ_B dépend de la masse effective m^* de l'électron.

→ Si $m^* = m_e$ (métaux de transition, terres rares), la susceptibilité de Pauli est 3 fois plus grande que celle de Landau.

→ Si $m^* < m_e$ (semi-conducteurs) c'est la susceptibilité de Landau qui domine.

VI) Aspects microscopiques du ferromagnétisme.

V - Interprétation microscopique du ferromagnétisme

Le paramagnétisme a été interprété dans le cadre d'un système de particules indépendantes. Dans ce cadre, on trouve que i) l'aimantation est nulle si $B=0$.
ii) il n'y a pas de transition de phase, le matériau paramagnétique à toute température.

Comme dans le cas de la thermodynamique des gaz, il faut tenir compte des interactions entre particules afin de rendre compte des comportements observés.

V.1 Modèle de champ moyen

Pour tenir compte de l'interaction entre atomes dans le matériau ferromagnétique, on suppose que le champ vu par un site est

$$\vec{B}_{s,ij} = \vec{B} + \vec{B}_{m,s} = \vec{B} + \lambda \mu_0 M$$

B_m est appelé champ moléculaire (Weiss 1907). La constante est caractéristique du matériau.

Le ferromagnétisme est alors traité dans une théorie de champ moyen. On réutilise l'expression obtenue pour le paramagnétisme avec l'expression du champ effectif.

Dans le cas du modèle à deux niveaux vu au chapitre précédent, on obtient :

$$M = n \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B}{kT}(B + \lambda \mu_0 M)\right)$$

M est solution d'une équation auto-cohérente dont on doit trouver les solutions possibles en fonction de la température T .

Pour résoudre cette équation, il est commode de réécrire l'équation précédente sous la forme générique :

$$\frac{M}{M_s} = \tanh\left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} + \frac{\mu_B B}{kT}\right)$$

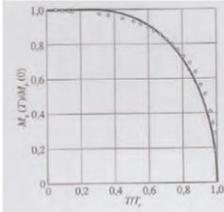
Qui fait intervenir l'aimantation maximale $M_s = n \mu_B$

Et la température de Curie $T_c = \lambda \mu_0 \frac{n \mu_B^2}{k}$

Remarque : pour un modèle différent d'un système de spins $\frac{1}{2}$, on aurait une fonction différente de $\tanh(x)$, mais l'approche reste similaire.

V.2 Comparaison du modèle de champ moyen aux mesures

Evolution de l'aimantation à saturation en fonction de la température



Au voisinage de la transition

$$\frac{M}{M_s} = \tanh\left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s}\right)$$

$$\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3}$$

$$M \approx \sqrt{3} M_s \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}$$

Susceptibilité dans le domaine paramagnétique : réponse en champ imposé
G. Develey, Journal de Physique, 1968

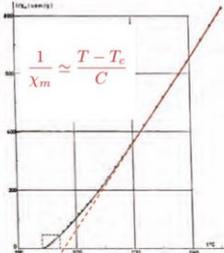


Fig. 7. - Variation de $(1/\chi_m T)$ du cobalt.

Pour $T > T_c$, M est faible, on peut linéariser l'éq. au premier ordre

$$\frac{M}{M_s} = \tanh\left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} + \frac{\mu_B B}{kT}\right)$$

pour obtenir

$$\frac{M}{M_s} \approx \frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} + \frac{\mu_B B}{kT}$$

Le modèle permet de reproduire la loi de Curie-Weiss

$$M \approx \frac{C}{T - T_c} \frac{B}{\mu_0} \quad C = \frac{M_s \mu_0 \mu_B}{k}$$

Le modèle de champ moyen permet donc de reproduire qualitativement les observations expérimentales, mais il n'est pas bon proche de la transition

Pour résoudre l'équation précédente, on pose alors

$$m = \frac{M}{M_s} \quad \xi = \frac{T_c}{T} m + \frac{\mu_B B}{kT}$$

De telle sorte que la solution est l'intersection des courbes

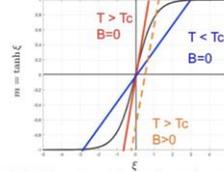
$$m = \tanh \xi \quad m = \frac{T_c}{T} \xi - \frac{\mu_B B}{kT_c}$$

La solution s'obtient alors graphiquement.

Dans le cas $B=0$ (champ nul imposé)

$T > T_c$, 1 solution $M=0$

$T < T_c$, 3 solutions.
 $M=0$ (instable)
 M non nul



Il y a deux cas de figure :

- Haute température, $T > T_c$, il n'existe qu'une intersection qui correspond à la solution $M=0$. L'aimantation est nulle en champ nul. Le milieu ne présente pas d'aimantation spontanée, il est paramagnétique.

- Basse température, $T < T_c$ la pente de la droite est inférieure à 1 et il existe 3 solutions. $M=0$ (qui est instable), et deux solutions opposées M et non nulles. Le milieu présente une aimantation spontanée, il est ferromagnétique.

Dans le cas B non nul

Si B est positif, la droite d'équation $m = \frac{T_c}{T} \xi - \frac{\mu_B B}{kT_c}$ est translatée vers le bas.

Dans le cas $T > T_c$ (courbe en pointillés), il n'y a une intersection avec la courbe $\tanh(x)$ qui donne $M=0$. On retrouve que M est non nul si B est non nul (paramagnétisme).

Dans le cas $T < T_c$, il y a 3 solutions non nulles, la solution M dans le même sens que B est favorisée thermodynamiquement.

V.3 Origine de l'interaction

Ce n'est pas une interaction dipôle-dipôle. Si l'on considère deux dipôles magnétiques distants d'une maille et que l'on estime leur énergie d'interaction

$$\vec{m}_1 \quad \vec{m}_2 \quad U_{int} \approx -\vec{m}_1 \cdot \vec{B}_2$$

On trouve que le champ exercé par un atome sur son voisin est de l'ordre de 1 Tesla

$$m \approx \mu_B = \frac{e\hbar}{m_e} \sim 10^{-23} \text{ A.m}^2 \quad B \approx \frac{\mu_0 \mu_B}{2\pi a^3} \sim 1 \text{ T}$$

Cette énergie est donc faible devant l'agitation thermique, elle est trop faible pour conduire à un ordre magnétique. $\frac{U_{int}}{kT} \sim 0.01$

L'origine de l'interaction réside dans l'interaction d'échange.

qui provient en l'interaction électrostatique de répulsion entre électrons (négligée en 1^{ère} approximation), combinée au principe d'exclusion de Pauli. Elle se met sous la forme effective :

$$U_{ij} = -J \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad \vec{m}_i = \mu_B \vec{s}_i$$

Si $J > 0$, il y a un gain en énergie lorsque les moments (ou spins) sont de même sens. Pour $J < 0$, il y a anti-alignement (ferromagnétisme).

Expliquons avec les mains pourquoi les états $++$, $+-$, $-+$ ne correspondent pas à la même énergie. Supposons pour cela que l'on ait que deux électrons chacun au voisinage d'un atome formant une molécule de type H_2 .

Le hamiltonien d'interaction entre électrons est $H_{int} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$

Si les électrons ont même spin ($++$ ou $--$)

la partie spatiale de la fonction d'onde est antisymétrique (Pauli) et s'annule entre les protons. Les e^- ne peuvent être au même endroit puisqu'ils ont même spin. <Hint> sera faible car r_{12} est assez grand.

Si les électrons ont des spins différents ($+ -$ ou $- +$)

la partie spatiale est alors symétrique (Pauli) et les e^- peuvent se trouver au même endroit. <Hint> est plus grand car r_{12} peut être plus faible.

Les états $+-$ sont plus bas en énergie que les états $++$, ce qui peut se décrire en utilisant $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$

Remarque : on voit que J dépend fortement de la géométrie du matériau et de ses fonctions d'onde. Il y a donc une grande variété de situations.

Dans ce cadre, le système magnétique peut être décrit par le Hamiltonien de Heisenberg :

$$\vec{m}_i = \mu_B \vec{s}_i \quad H = -\mu_B \sum_i \vec{s}_i \cdot \vec{B}_0 - J \sum_{\text{(paires)}} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (1)$$

pour lequel la somme de droite fait intervenir les paires de moments magnétiques.

H peut s'écrire sous une forme faisant apparaître ce qui ressemble à un champ B effectif :

$$H = -\mu_B \sum_i \vec{s}_i \cdot \left(\vec{B} + \frac{J}{\mu_B} \sum_{j \neq i} \vec{s}_j \right) + \text{cte} \quad (2)$$

L'aimantation est lié à la moyenne $\langle \vec{s} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \vec{s}_i$

par la relation $\vec{M} = n\mu_B \langle \vec{s} \rangle$

Pour traiter le problème par une approche de type champ moyen, on suppose que l'orientation des moments magnétiques ne fluctue pas. La somme de droite s'écrit à l'aide du nombre de voisins Nv

$$\sum_{j \neq i} \vec{s}_j \approx Nv \langle \vec{s} \rangle$$

On aboutit à une expression pour le champ effectif

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B} + \lambda \mu_0 \vec{M} \quad \text{avec} \quad \lambda = \frac{JNv}{n\mu_B^2 \mu_0}$$

Pour calculer la constante (notée K) présente dans le hamiltonien (2) car on a compté des paires deux fois, il suffit de calculer la moyenne de l'expression (1) et de l'expression (2) dans l'approximation C.M.

Dans le cas (2), on a : $\langle H \rangle = -\mu_B N \langle \vec{s} \rangle \cdot \vec{B}_0 - JNNv \langle \vec{s} \rangle^2 + K$

Dans le cas (1), il n'y a que N/2.Nv paires

$$\langle H \rangle = -\mu_B N \langle \vec{s} \rangle \cdot \vec{B}_0 - JNNv/2 \langle \vec{s} \rangle^2$$

La véritable expression du Hamiltonien C.M. fait donc intervenir une constante, qui n'en est pas vraiment une puisqu'elle dépend de l'inconnue du problème, M.

$$H = -\mu_B \sum_i \vec{s}_i \cdot (\vec{B}_0 + \lambda \mu_0 \vec{M}) + J \frac{N N v}{2} \left(\frac{M}{n \mu_B} \right)^2$$

C'est la bonne expression si l'on veut comprendre quelles solutions pour M sont stables, et lesquelles sont instables.

V.3 Comment connaître la stabilité des solutions ?

La température et le volume sont imposés. L'énergie libre $F = -kT \log Z$ est donc le potentiel thermodynamique du système.

F atteint un minimum à l'équilibre sachant que T et V sont fixes. M apparaît comme un degré de liberté interne au système qui s'ajuste pour assurer que F atteint bien un minimum sous ces contraintes.

Un état d'équilibre stable satisfait donc à :

$$\frac{\partial F}{\partial M} \Big|_{T,V} = 0 \quad \frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \Big|_{T,V} \geq 0$$

Puisqu'on connaît l'expression du hamiltonien, on connaît la fonction de partition Z. Dans le cadre de la statistique de Boltzmann on a donc :

$$Z = (\exp(-H(s = +h/2)/kT) + \exp(-H(s = -h/2)/kT))^N$$

L'énergie libre est donc :

$$F = -NkT \log \left(2 \exp \left(-J \frac{Nv}{2kT} \left(\frac{M}{n\mu_B} \right)^2 \right) \cosh \left(\frac{\mu_B B_{\text{eff}}}{kT} \right) \right)$$

Comme $\log(\exp(x))=x$, l'expression se simplifie en :

$$F = NkT_c \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{M}{M_s} \right)^2 - \frac{T}{T_c} \log \left(2 \cosh \left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} \right) \right) \right\}$$

Avec les notations $M_s = n\mu_B$ $kT_c = JNv$

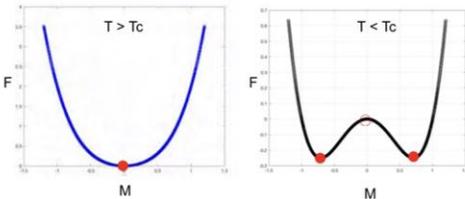
La condition d'équilibre $\frac{\partial F}{\partial M} \Big|_{T,V} = 0$ donne l'équation d'autocoherence

$$\frac{NkT_c}{M_s} \left(M - M_s \tanh \left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} \right) \right) = 0$$

On retrouve donc le résultat établi en section V.1. Une seule solution M=0 pour $T > T_c$ et trois solutions [M=0 et deux solutions opposées non nulles] pour $T < T_c$.

La différence majeure par rapport au traitement simple fait auparavant est que la connaissance de F permet de connaître la stabilité des solutions.

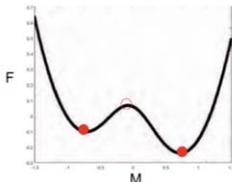
On peut tracer la forme F(M,T fixe) pour $T > T_c$ (gauche) et $T < T_c$ (droite)



Pour $T > T_c$, F(M,T fixe) ne présente qu'un extremum en M=0 : C'est un minimum, la dérivée seconde est manifestement positive, cette solution est stable.

Pour $T < T_c$, F(M,T fixe) présente trois solutions possibles : La solution M=0 est un maximum local, la dérivée seconde est négative et cette solution est instable. Les solutions (M non nul) correspondent à des minima sont aussi stables l'une que l'autre.

En champ non nul (avec ici $B_0 > 0$), la solution M>0 est la plus stable. La solution négative est aussi thermodynamiquement possible, mais elle est métastable et il faut regarder la profondeur du puits pour savoir si elle est observable.



Remarque : il est très rare de pouvoir calculer explicitement F, et la transition est généralement décrite de manière phénoménologique à l'aide d'un développement à la Landau.

Nous verrons en TD comment la transition ferro-para est bien décrite par un développement de la forme : $F/V = a(T - T_c)M^2 + bM^4$

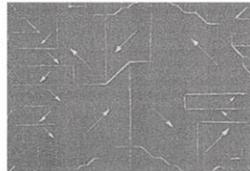
En exercice : on peut montrer que l'énergie libre C.M. se met sous cette forme lorsque la température est proche de T_c (M est alors petit).

VI Aimantation rémanente

Dans le cadre des modèles développés, puisque la température ambiante est telle que $T < T_c$, les matériaux magnétiques devraient présenter une aimantation rémanente proche de la saturation. Or on observe que ce n'est pas du tout le cas, et l'on a même souvent $M_r \ll M_s \dots$

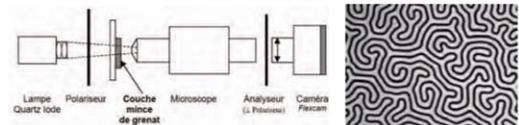
Le premier à avoir proposé une raison est Pierre Weiss (1906), qui a supposé le que matériau est en fait formé de petits domaines au sein desquels l'aimantation est quasiment saturée, mais dont l'orientation est aléatoire au sein du matériau.

Ces domaines ont par la suite été observés expérimentalement. Par exemple dans le cas du fer, on peut visualiser les domaines par la méthode des poudres (image issue du livre de Kittel).



Sur un domaine, le champ est quasiment homogène mais il varie beaucoup à l'interface entre domaines (parois de Bloch). Le gradient de B y est fort et une poudre magnétique s'y concentre. Les flèches correspondent ici au sens de déplacement des parois lors de l'application d'un champ magnétique extérieur.

Une méthode plus moderne (voir fascicule de TP) utilise la rotation faraday de la lumière polarisée au travers d'une fine couche de Grenat ferrimagnétique.

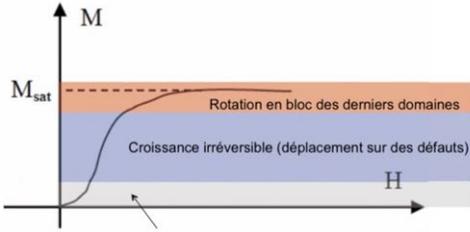


Cette expérience qualitative (ne pas faire en montage) permet une observation directe des parois de Bloch au microscope entre un polariseur et un analyseur si on applique un champ magnétique fort à l'échantillon. Utiliser une bobine à noyau de fer en forme de pointe.

VI De l'origine de l'hystérésis

Comme souvent lorsqu'on le rencontre, le phénomène d'hystérésis provient des défauts du système (défauts cristallins ici, rugosités pour l'angle de mouillage en capillarité ...).

Lorsqu'on applique un champ magnétique à un matériau et que l'on l'aimante, plusieurs phénomènes se produisent de manière successive.



Croissance réversible de domaines d'orientation favorable

Au départ, l'action de B ne fait que déplacer des parois de Bloch de manière réversible, certains domaines favorisés grossissent et d'autres rapetissent.

Les parois finissent par accrocher des défauts et il faut augmenter un peu le champ pour réussir à passer ce qui s'apparente à une barrière. Une fois passé cette barrière, la paroi reste accrochée sur la défaut et tout ne revient pas arrière lorsqu'on coupe le champ. La croissance est irréversible.

Ce mécanisme n'est cependant pas suffisant pour réussir à saturer l'échantillon. Certains domaines restent aimantés dans une direction autre que celle du champ de sorte que les moments dipolaires subissent un couple magnétique. Lorsque le champ est suffisamment intense, ces le moment dipolaire des atomes au sein des domaines finissent par tourner en bloc et l'aimantation sature.

VII De l'origine des domaines de Weiss

Si l'état d'équilibre d'un système magnétique résulte de la minimisation du potentiel thermodynamique du système, le processus est complexe.

Il y a en premier lieu un gain en énergie dans le volume de chaque domaine, stabilisant, due à l'orientation collective au sein des domaines. Avec une telle Observation, on devrait avoir donc observer des matériaux saturés.

Toutefois une orientation globale conduit à une énergie globale très élevée puisque le système produit un champ dans tout l'espace.

On peut s'en rendre compte en étudiant l'énergie de la distribution

$$U = \iiint_{\infty} \frac{\vec{H} \cdot \vec{B}}{2} dV \quad U = \frac{1}{2\mu_0} \iiint_{\infty} B^2 dV - \frac{1}{2} \iiint_{V_0} \vec{M} \cdot \vec{B} dV$$

Qui fait apparaître une énergie du champ magnétique créé ainsi que le gain en volume du fait d'une orientation favorable de l'aimantation.

dipôle $1/r^3$

quadrupôle $1/r^4$

Domaine fermé
 $B_{ext}=0$

Avec des distributions d'aimantations identiques, on peut diminuer beaucoup l'énergie du champ B en renversant l'aimantation, i.e. en créant des domaines. Ces domaines font naturellement apparaître des parois qui ont elles aussi un coût énergétique (proportionnel à la surface). De la compétition entre gain en volume et coût en surface, des défauts, il résultera une taille caractéristique qui sera la taille typique d'un domaine pour le corps considéré ...

Fermeture des domaines dans du fer très pur

Dans un barreau très pur et sans défaut, la fermeture idéale des domaines peut être observée.



Figure 34. Croissance de fermeture à l'échelle d'un micromètre d'un échantillon de fer monocristallin. La surface est en noir (1992). Texte du chapitre est ©2013 Internationaler der B.I. Cooney, C.C. Scott et A. Sell.

Matériaux ferromagnétiques: Fer, Cobalt, Nickel

Matériaux	T° de Curie		Susceptibilité magnétique χ_m
	K	°C	
Co	1 388	1 115	70
Fe α, aciers ferritiques et martensitiques	1 043	770	200
MnBi	630	357	
Ni	627	354	110
MnSb	587	314	
CrO ₂	386	113	
MnAs	318	45	
Gd	292	19	
Dy	88	-185	
EuO	69	-204	

Matériau anti ferromagnétique:

↳ le chrome est le seul à Tamb.

Matériaux ferrimagnétiques:

↳ spins opposés mais de norme différentes
⇒ cristal de plusieurs atomes.

Ex: NiFe₂O₄, CoFe₂O₄, CuFe₂O₄.

Annexe A. Traitement quantique de l'expérience de Stern et Gerlach.

2 La description quantique du problème

La première étape de cette description quantique est de préciser l'espace des états d'un atome dans cette expérience, en déterminant les degrés de liberté de l'atome. Il y a *a priori* deux classes de degrés de liberté en jeu. Tout d'abord les atomes sont des particules mobiles dans l'espace, avec des degrés de liberté de translation suivant chacune des trois directions x , y , z . A cette classe de degrés de liberté spatiaux vient s'ajouter un autre degré de liberté qui correspond au moment magnétique interne de l'atome.

Dans le cas d'atomes d'hélium dans leur niveau fondamental, pour lesquels aucune déflexion n'est observée, le degré de liberté interne peut être ignoré ;

la description de l'état de l'atome se fait par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ dont l'évolution est déterminée par l'équation de Schrödinger pour une particule libre (chapitre 2). Au contraire, pour un atome comme l'argent, le degré de liberté interne associé au moment magnétique joue un rôle essentiel. C'est ce degré de liberté qui conduit à la séparation des trajectoires atomiques dans le gradient de champ magnétique et qui donne naissance aux deux taches sur l'écran de détection.

L'espace des états que nous sommes amenés à considérer pour rendre compte de l'expérience de Stern et Gerlach a une structure d'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{externe}} \otimes \mathcal{E}_{\text{interne}}$. L'espace associé aux degrés de liberté de translation $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ est l'espace des fonctions d'onde vu aux chapitres 2 et 3 : $\mathcal{E}_{\text{externe}} = \mathcal{L}^2(R^3)$. Pour construire l'espace $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ associé au degré de liberté correspondant au moment magnétique interne de l'atome, nous remarquons que l'expérience de Stern et Gerlach réinterprétée dans un langage quantique peut être considérée comme une mesure de l'observable *composante suivant z du moment magnétique de l'atome*. Nous noterons par définition cette observable $\hat{\mu}_z$.

La première observation expérimentale est que, quel que soit l'état de moment magnétique de l'atome, la mesure de μ_z donne l'un des deux résultats $+\mu_0$ et $-\mu_0$, et seulement l'un de ces deux résultats. Par conséquent, la dimension de l'espace $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ est au moins 2. Il y a au moins deux états propres de $\hat{\mu}_z$, avec valeurs propres $+\mu_0$ et $-\mu_0$.

Bien entendu, l'axe z n'a rien de particulier. Les mêmes considérations s'appliquent aux projections μ_x et μ_y du moment magnétique suivant les axes x et y , et aux observables correspondantes $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$. Il y a au moins deux états propres de $\hat{\mu}_x$ avec valeurs propres $\pm\mu_0$, de même pour $\hat{\mu}_y$.

Dans quel espace $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ doit-on décrire les états de moment magnétique de l'atome ? La réponse à cette question n'est pas évidente. Classiquement, le moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ d'un système est une grandeur physique vectorielle, caractérisée par ses trois composantes (μ_x, μ_y, μ_z) dans un système d'axes. Quantiquement, nous avons affaire à un ensemble de trois observables $(\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z)$ dont nous savons déjà que chacune n'a que deux valeurs propres $+\mu_0$ et $-\mu_0$.

L'étonnant est que l'on peut expliquer les résultats expérimentaux en faisant l'hypothèse « minimale » que l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ des états de moment magnétique est de dimension 2. Comme nous allons le voir, cette hypothèse est cohérente et permet d'expliquer tous les phénomènes liés à ce moment magnétique dans l'expérience de Stern et Gerlach².

Supposons donc que $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ soit de dimension 2. Une base de cet espace peut alors être formée par les deux états propres de $\hat{\mu}_z$ correspondant aux deux résultats de mesure $+\mu_0$ et $-\mu_0$. Nous noterons ces états $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$.

²Comme toujours en physique (classique ou quantique), il n'est pas question de prouver que l'explication théorique avancée est la seule acceptable, mais simplement de proposer un cadre théorique, aussi simple que possible, dans lequel on peut rendre compte de tous les phénomènes observés.

Par définition,

$$\hat{\mu}_z|+\rangle_z = \mu_0|+\rangle_z \quad , \quad \hat{\mu}_z|-\rangle_z = -\mu_0|-\rangle_z \quad , \quad (8.11)$$

et un état interne quelconque $|\mu\rangle$ de l'atome s'écrit :

$$|\mu\rangle = \alpha|+\rangle_z + \beta|-\rangle_z \quad (8.12)$$

avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Une mesure de la composante μ_z du moment magnétique donne alors $+\mu_0$ (c'est-à-dire : l'atome arrive dans la tache du haut) avec probabilité $|\alpha|^2$ et $-\mu_0$ (tache du bas) avec probabilité $|\beta|^2$.

Dans une représentation matricielle, on a dans la base $\{|\pm\rangle_z\}$:

$$|+\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\mu\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (8.13)$$

et

$$\hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad . \quad (8.14)$$

3 Les observables $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$

Considérons maintenant la situation expérimentale représentée sur la figure 8.3. On dispose en série deux aimants successifs. Le premier aimant crée un gradient suivant l'axe z et il clive le jet atomique en deux faisceaux correspondant aux deux états internes $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$. On dispose à la sortie de ce premier aimant un obturateur qui ne laisse passer que le faisceau $|+\rangle_z$. Ce faisceau est ensuite envoyé dans un aimant créant un gradient le long de l'axe x orthogonal à l'axe z . On mesure alors *la composante suivant x* du moment magnétique atomique, observable quantique que nous noterons $\hat{\mu}_x$. Le résultat observé est que le faisceau est clivé en deux faisceaux *d'égale intensité* correspondant à des valeurs du moment magnétique suivant x égales à $+\mu_0$ et $-\mu_0$.

Cherchons maintenant à caractériser l'opérateur $\hat{\mu}_x$. Par hypothèse, cet opérateur, qui agit dans $\mathcal{E}_{\text{interne}}$, doit être décrit par une matrice 2×2 dans la base $|\pm\rangle_z$:

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} \alpha_x & \beta_x \\ \gamma_x & \delta_x \end{pmatrix} \quad . \quad (8.15)$$

Plusieurs contraintes existent sur les quatre paramètres $\alpha_x, \beta_x, \gamma_x, \delta_x$:

1. L'opérateur $\hat{\mu}_x$ est hermitien, donc α_x et δ_x sont réels, et $\gamma_x = \beta_x^*$.
2. Les résultats de mesure possibles pour l'observable composante suivant x du moment magnétique sont $+\mu_0$ et $-\mu_0$. Ce sont les valeurs propres de $\hat{\mu}_x$, ce qui impose :

$$\text{somme des val. pr.} = \text{Tr}(\hat{\mu}_x) \Rightarrow \alpha_x + \delta_x = 0 \quad , \quad (8.16)$$

$$\text{produit des val. pr.} = \text{Det}(\hat{\mu}_x) \Rightarrow \alpha_x \delta_x - \beta_x \gamma_x = -1 \quad . \quad (8.17)$$

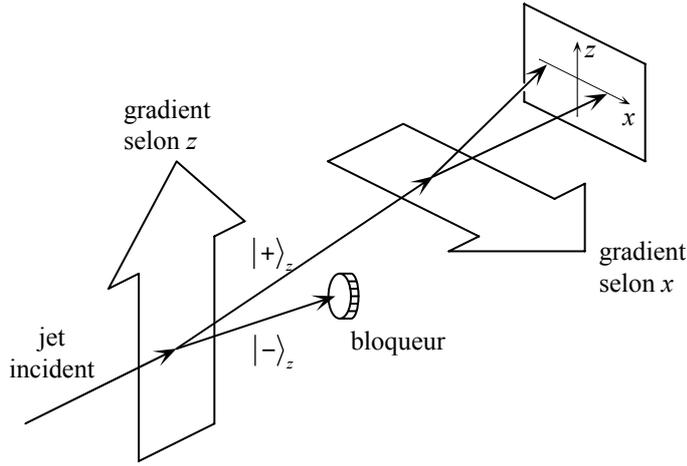


FIG. 8.3: Un faisceau d'atomes d'argent traverse deux zones magnétiques, la première créant un gradient suivant z , la seconde un gradient suivant x . À l'issue du premier aimant, un obturateur ne laisse passer que les atomes dans l'état interne $|+\rangle_z$. Le second aimant permet de faire sur ces atomes une mesure de la composante suivant x du moment magnétique. On trouve les deux résultats $\pm\mu_0$ avec des probabilités égales.

3. Si l'état initial est $|+\rangle_z$ et que l'on mesure μ_x , on trouve les résultats $+\mu_0$ et $-\mu_0$ avec la même probabilité. La valeur moyenne des résultats est donc 0 pour cet état initial, ce qui se traduit par :

$$0 = {}_z\langle +|\hat{\mu}_x|+\rangle_z = \mu_0\alpha_x . \quad (8.18)$$

En combinant l'ensemble de ces contraintes, on déduit que l'opérateur $\hat{\mu}_x$ est nécessairement de la forme :

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_x} \\ e^{i\phi_x} & 0 \end{pmatrix} . \quad (8.19)$$

Dans le raisonnement qui précède, nous avons privilégié l'axe x ; ce raisonnement aurait en fait pu se faire pour n'importe quel axe pourvu qu'il soit orthogonal à z . En particulier, pour l'axe y orthogonal à la fois à x et z , on peut reprendre la même démarche et aboutir à une expression similaire à (8.19) :

$$\hat{\mu}_y = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_y} \\ e^{i\phi_y} & 0 \end{pmatrix} . \quad (8.20)$$

Il nous reste maintenant à établir la relation entre les coefficients ϕ_x et ϕ_y entrant dans (8.19) et (8.20). Pour cela, considérons un jet d'atomes préparés dans l'état propre de $\hat{\mu}_x$ associé à $+\mu_0$. Cet état propre, que nous noterons

$|+\rangle_x$, s'écrit dans la base $|\pm\rangle_z$:

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + e^{i\phi_x} |-\rangle_z) . \quad (8.21)$$

Si l'on mesure, pour des atomes préparés dans cet état, la composante suivant y du moment magnétique, il est clair par simple transposition des résultats expérimentaux précédents que l'on trouvera les deux résultats $\pm\mu_0$ avec la même probabilité. La valeur moyenne du résultat est donc nulle, ce qui entraîne :

$$0 = {}_x\langle + | \hat{\mu}_y | + \rangle_x = \mu_0 \cos(\phi_x - \phi_y) \quad \Rightarrow \quad \phi_y - \phi_x = \frac{\pi}{2} \quad [\pi] . \quad (8.22)$$

On pourra se convaincre qu'il n'est pas possible de pousser plus avant la détermination³ de ϕ_x et ϕ_y . Tout couple satisfaisant la relation (8.22) conduit à des opérateurs $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$ qui permettent de rendre compte de l'ensemble des résultats expérimentaux. Pour simplifier les notations, nous choisirons le couple particulier $\phi_x = 0, \phi_y = \pi/2$, ce qui conduit finalement aux trois opérateurs $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z$ décrivant les trois composantes du moment magnétique suivant les trois axes :

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\mu}_y = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (8.23)$$

Nous retrouvons, au coefficient μ_0 près, les matrices de Pauli introduites au chapitre 6 (eq. (6.5)). Les états propres de $\hat{\mu}_x$ et de $\hat{\mu}_y$ sont :

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z \pm |-\rangle_z) \quad |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z \pm i|-\rangle_z) . \quad (8.24)$$

4 Discussion

4.1 L'incompatibilité des mesures suivant des axes différents

Les trois opérateurs $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z$ que nous venons de trouver ne commutent pas entre eux. Plus précisément, on vérifiera que l'on obtient les trois relations de commutation cycliques :

$$[\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_z \quad , \quad [\hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_x \quad , \quad [\hat{\mu}_z, \hat{\mu}_x] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_y . \quad (8.25)$$

En termes physiques, cela signifie que l'on ne peut pas connaître simultanément deux composantes du moment magnétique d'un atome. Partons d'atomes dans l'état $|+\rangle_z$ (composante suivante z connue) et mesurons la composante du moment magnétique suivant x ; nous avons vu que deux résultats sont possibles,

³Le seul élément supplémentaire consiste à imposer que le trièdre (x, y, z) est direct; l'arbitraire de phase qui subsiste reflète l'arbitraire du choix de la paire d'axes x et y dans le plan orthogonal à z .

$\pm\mu_0$, avec la même probabilité. Supposons que l'on trouve $+\mu_0$. Après cette mesure de μ_x , l'état de l'atome est l'état propre de $\hat{\mu}_x$ associé à cette valeur propre :

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle_z + |-\rangle_z) .$$

Une mesure de μ_x sur l'état ci-dessus redonnera le résultat $+\mu_0$. En revanche, si l'on revient à une mesure de μ_z , l'expression de $|+\rangle_x$ montre que la nouvelle mesure donnera les deux résultats $\pm\mu_0$ avec des probabilités égales. Comme on était parti de l'état $|+\rangle_z$ pour lequel la composante suivant z du moment magnétique était parfaitement déterminée, on voit que la mesure intermédiaire de μ_x a changé (ou perturbé) l'état du système.

On retrouve ici le caractère paradoxal de la « logique » quantique par opposition à la logique des probabilités classiques : on ne peut pas trier des objets quantiques en catégories A et B (blanc ou noir par exemple), puis scinder chaque catégorie en sous-catégories 1 et 2 (petit ou gros), et ainsi de suite. Dans l'exemple de l'expérience de Stern et Gerlach, le tri en catégories $\mu_z = +\mu_0$ et $\mu_z = -\mu_0$ perd tout son sens si on effectue ensuite un tri en sous-catégories $\mu_x = +\mu_0$ et $\mu_x = -\mu_0$.

4.2 Flou classique ou flou quantique ?

Que donnerait ce type de raisonnement dans le cadre de la mécanique classique ? À première vue, dans un appareil de Stern et Gerlach orienté le long de l'axe z , un moment magnétique va précesser autour de cet axe, en effectuant un grand nombre de tours entre l'entrée et la sortie. Comme en mécanique quantique, les valeurs finales de μ_x et μ_y semblent donc *a priori* décorrélatées des valeurs initiales. Néanmoins rien n'interdit, au moins en théorie, de supposer que l'on possède un contrôle suffisant des trajectoires atomiques et du champ magnétique pour que l'angle de précession représente un nombre entier de tours, avec une précision arbitrairement bonne. On arrive alors à une situation où l'on peut mesurer μ_z sans perturber μ_x et μ_y .

Les choses se compliquent si l'on fait une description ondulatoire du centre de masse du moment magnétique, tout en continuant à traiter ce moment magnétique comme une variable classique. À l'entrée de l'appareil de Stern et Gerlach, le paquet d'onde a une étendue transverse Δz et une dispersion en impulsion Δp_z , avec $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$. Notons $b' = \partial B_z / \partial z$ le gradient le long de l'axe z et T la durée de la traversée de l'aimant. Pour que la mesure de μ_z soit précise, il faut que la variation d'impulsion transverse lors de la traversée soit grande devant la dispersion initiale :

$$\mu_0 b' T \gg \Delta p_z \quad , \quad (8.26)$$

sinon la divergence du jet à la sortie de l'aimant sera essentiellement le reflet de la divergence initiale. Par ailleurs, l'angle de précession ne peut être constant du fait de l'inhomogénéité du champ sur l'extension Δz . Celle-ci induit une dispersion $\Delta\omega_0 = \gamma_0 b' \Delta z$ de la fréquence de Larmor (8.9). Pour que les

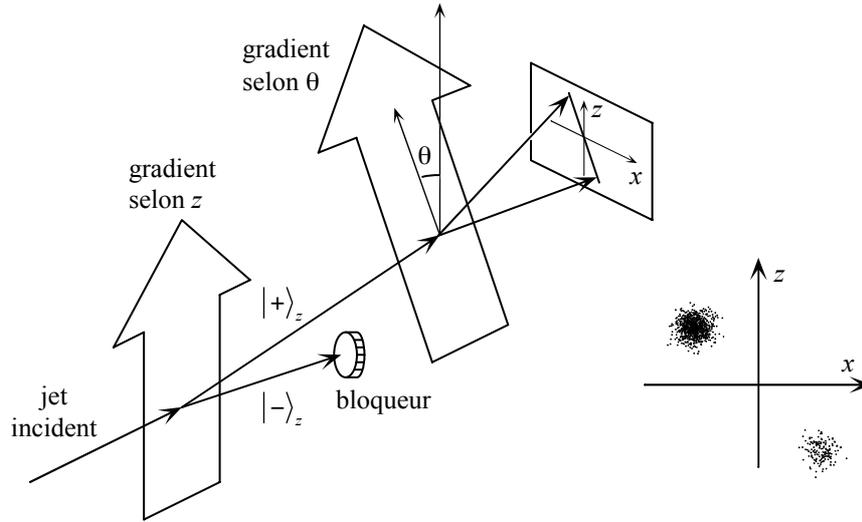


FIG. 8.4: Un faisceau d'atomes d'argent est préparé dans l'état $|+\rangle_z$, puis traverse un gradient de champ magnétique dirigé \mathbf{u}_θ . On mesure ainsi la composante du moment magnétique des atomes suivant \mathbf{u}_θ ; les deux résultats possibles sont $+\mu_0$ et $-\mu_0$ avec les probabilités respectives $\cos^2(\theta/2)$ et $\sin^2(\theta/2)$. On a indiqué dans le coin inférieur droit le résultat typique pour $\theta = \pi/4$.

valeurs de μ_x et μ_y ne soient pas « brouillées » lors de la traversée de l'aimant, il faut que la dispersion de l'angle de précession soit petite :

$$T \Delta\omega_0 = T \gamma_0 b' \Delta z \ll 2\pi \quad . \quad (8.27)$$

Or, du fait de l'inégalité de Heisenberg et du résultat expérimental $\mu_0 \sim \hbar\gamma_0$ (voir (8.10)), les conditions (8.26–8.27) ne peuvent être satisfaites simultanément : la description ondulatoire du mouvement du centre de masse de l'atome suffit à rendre « incompatibles » les mesures de μ_x , μ_y et μ_z .

4.3 Mesure suivant un axe quelconque

Jusqu'à maintenant, nous nous sommes limités à des mesures selon un des trois axes x , y , z . Cherchons maintenant à décrire la mesure de la composante du moment magnétique selon un axe quelconque. L'expérience est schématisée sur la figure 8.4. On place un appareil de Stern et Gerlach selon une direction arbitraire définie par le vecteur unitaire \mathbf{u}_θ tel que :

$$\mathbf{u}_\theta = \mathbf{u}_x \sin \theta + \mathbf{u}_z \cos \theta \quad . \quad (8.28)$$

Du point de vue de la physique classique, cette expérience est une mesure de la composante μ_θ suivant \mathbf{u}_θ du moment magnétique atomique, soit $\mu_\theta =$

$\mu_x \sin \theta + \mu_z \cos \theta$. Le principe de correspondance suggère donc que l'observable associée s'écrit :

$$\hat{\mu}_\theta = \hat{\mu}_x \sin \theta + \hat{\mu}_z \cos \theta = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (8.29)$$

Ce choix assure que les valeurs moyennes $\langle \mu_x \rangle$, $\langle \mu_y \rangle$ et $\langle \mu_z \rangle$ des composantes du moment magnétique se transforment comme celles d'un vecteur de R^3 dans une rotation, ce qui est essentiel.

Comme $\hat{\mu}_x$, $\hat{\mu}_y$, $\hat{\mu}_z$, cet opérateur a pour valeurs propres $\pm \mu_0$; ses vecteurs propres s'écrivent :

$$|+\rangle_\theta = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (8.30)$$

$$|-\rangle_\theta = -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (8.31)$$

Les résultats observés expérimentalement sont les suivants : si un faisceau atomique préparé dans l'état $|+\rangle_z$ est envoyé dans un gradient de champ dirigé suivant \mathbf{u}_θ , on trouve que ce faisceau se clive en deux faisceaux correspondant à un moment magnétique suivant \mathbf{u}_θ égal à $+\mu_0$ et $-\mu_0$, avec une intensité respective $I^+(\theta) = I_0 \cos^2(\theta/2)$ et $I^-(\theta) = I_0 \sin^2(\theta/2)$.

Pour rendre compte de ce résultat, appliquons le postulat de la mesure tel qu'il a été présenté au chapitre 5. Une mesure de l'observable $\hat{\mu}_\theta$ peut conduire à deux résultats possibles, qui sont les valeurs propres $\pm \mu_0$. Pour un système préparé dans l'état $|+\rangle_z$, les probabilités respectives de ces deux résultats sont :

$$p_+ = |\langle + | + \rangle_z|^2 = \cos^2(\theta/2), \quad (8.32)$$

$$p_- = |\langle - | + \rangle_z|^2 = \sin^2(\theta/2). \quad (8.33)$$

On comprend alors pourquoi la mesure expérimentale, qui implique un grand nombre d'atomes, donne deux taches avec des intensités dans le rapport $\cos^2(\theta/2), \sin^2(\theta/2)$. La mesure ne donne donc un résultat certain que lorsque θ vaut 0 ou π , c'est-à-dire que l'axe \mathbf{u}_z de préparation et l'axe \mathbf{u}_θ de détection sont parallèles ou antiparallèles.

5 Description complète de l'atome

On se pose maintenant la question de savoir comment décrire complètement l'état de l'atome. L'état spatial se décrit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ des fonctions de carré sommable sur l'espace à trois dimensions $\mathcal{L}^2(R^3)$. L'état interne correspondant au degré de liberté associé au moment magnétique se décrit dans l'espace $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ de dimension 2 introduit ci-dessus.

5.1 Espace de Hilbert

L'espace de Hilbert est le produit tensoriel de ces deux espaces :

$$\mathcal{E}_H = \mathcal{E}_{\text{externe}} \otimes \mathcal{E}_{\text{interne}} .$$

Tout élément $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_H$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle , \quad (8.34)$$

où $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont des éléments de $\mathcal{E}_{\text{externe}}$, c'est-à-dire des fonctions de \mathbf{r} de carré sommable, et $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont les états propres de $\hat{\mu}_z$. Pour simplifier les notations, nous omettrons dans la suite l'indice z lors de l'écriture des kets $|\pm\rangle_z$. Les observables d'espace \hat{A}_{ext} (par exemple \hat{x} ou \hat{p}) et les observables de moment magnétique $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z$ agissent dans des espaces différents et par conséquent *commutent*. Le produit de deux telles observables est défini par :

$$(\hat{A}_{\text{ext}} \otimes \hat{\mu}_x)(|\psi_\epsilon\rangle \otimes |\epsilon\rangle) = (\hat{A}_{\text{ext}}|\psi_\epsilon\rangle) \otimes (\hat{\mu}_x|\epsilon\rangle) \quad , \quad \epsilon = \pm 1 . \quad (8.35)$$

5.2 Représentation des états et observables

Il y a plusieurs représentations possibles des états, accompagnées de représentations correspondantes des observables. Nous en proposons ici deux, le choix entre elles (ou une troisième) étant uniquement une affaire de goût personnel.

a) Représentation « hybride ». Tout état $|\psi(t)\rangle$ est représenté par un vecteur de $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ dont les *composantes* sont des fonctions de carré sommable :

$$\psi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle . \quad (8.36)$$

Le produit scalaire de $|\psi(t)\rangle$ et $|\chi(t)\rangle$, représentés par $\psi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle$ et par $\chi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \chi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle$ est :

$$\langle \psi(t) | \chi(t) \rangle = \int (\psi_+^*(\mathbf{r}, t)\chi_+(\mathbf{r}, t) + \psi_-^*(\mathbf{r}, t)\chi_-(\mathbf{r}, t)) d^3r .$$

La signification physique de cette représentation découle de ce que l'on a affaire à un couple de variables aléatoires : \mathbf{r} et μ_z . La loi de probabilité de ce couple est la suivante :

$|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ (resp. $|\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$) est la probabilité de détecter la particule dans un voisinage d^3r du point \mathbf{r} , avec la projection μ_z de son moment magnétique égale à $+\mu_0$ (resp. $-\mu_0$).

Ceci entraîne les propriétés suivantes :

1. Normalisation :

$$\int (|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2) d^3r = 1 . \quad (8.37)$$

2. Densité de probabilité de trouver la particule en \mathbf{r} indépendamment de la valeur de μ_z :

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2 \quad . \quad (8.38)$$

3. **Probabilités conditionnelles.** Sachant que la particule est en \mathbf{r} (à d^3r près), les probabilités qu'une mesure de μ_z donne les résultats $+\mu_0$ et $-\mu_0$ s'écrivent :

$$P_+(\mathbf{r}, t) = \frac{|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2}{P(\mathbf{r}, t)} \quad P_-(\mathbf{r}, t) = \frac{|\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2}{P(\mathbf{r}, t)} \quad (8.39)$$

avec $P_+(\mathbf{r}, t) + P_-(\mathbf{r}, t) = 1$.

b) Fonction d'onde « à deux composantes ». Il peut être commode d'utiliser une représentation matricielle en colonne pour les états $|\psi(t)\rangle$:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad , \quad (8.40)$$

et matricielle en ligne pour $\langle\psi(t)|$:

$$(\psi_+^*(\mathbf{r}, t), \psi_-^*(\mathbf{r}, t)) \quad . \quad (8.41)$$

L'interprétation physique de ψ_+ et ψ_- comme amplitudes de probabilité du couple de variables aléatoires (\mathbf{r}, μ_z) est la même que ci-dessus.

Toute observable n'agissant que sur les variables *d'espace* est une matrice scalaire 2×2 , dont les éléments sont des opérateurs agissant dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. L'opérateur énergie cinétique s'écrit par exemple :

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \end{pmatrix} \quad .$$

Toute observable n'agissant que sur les variables de moment magnétique est une matrice numérique combinaison linéaire des matrices de Pauli (8.23) et de l'identité. Dans cette représentation, la somme ou le produit de deux observables est la somme ou le produit des matrices correspondantes.

5.3 Énergie de l'atome dans un champ magnétique

Si l'atome est plongé dans un champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, l'énergie potentielle magnétique s'écrit :

$$\hat{W} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}) \quad . \quad (8.42)$$

Dans cette formule, nous regroupons les trois observables $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y$ et $\hat{\mu}_z$ sous la forme d'une observable vectorielle $\hat{\boldsymbol{\mu}}$, de sorte qu'on a par définition :

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}) = \hat{\mu}_x B_x(\hat{\mathbf{r}}) + \hat{\mu}_y B_y(\hat{\mathbf{r}}) + \hat{\mu}_z B_z(\hat{\mathbf{r}}) \quad . \quad (8.43)$$

6 Évolution de l'atome dans un champ magnétique

6.1 Équation de Schrödinger

Supposons que l'atome soit en mouvement dans l'espace, placé dans un potentiel $V(\mathbf{r})$, et que, de surcroît, il subisse l'action d'un champ magnétique \mathbf{B} . L'hamiltonien est somme de deux termes :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ext}} \otimes \hat{I}_{\text{int}} + \hat{W} \quad (8.44)$$

où :

$$\hat{H}_{\text{ext}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})$$

est du même type que ce qui a été étudié aux chapitres 2, 3 et 4. En particulier, \hat{H}_{ext} n'agit pas sur la variable interne de moment magnétique. L'opérateur \hat{W} est donné par (8.42). Ce dernier agit dans l'espace $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ par l'intermédiaire des trois opérateurs $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z$. Si le champ est inhomogène, il agit également dans l'espace externe par l'intermédiaire des trois fonctions $B_x(\hat{\mathbf{r}}), B_y(\hat{\mathbf{r}}), B_z(\hat{\mathbf{r}})$.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle . \quad (8.45)$$

En choisissant la représentation des états (8.36) et en décomposant sur la base orthonormée $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, on obtient le système différentiel couplé :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(\mathbf{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ &+ \langle + | \hat{W} | + \rangle \psi_+(\mathbf{r}, t) + \langle + | \hat{W} | - \rangle \psi_-(\mathbf{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(\mathbf{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi_-(\mathbf{r}, t) \\ &+ \langle - | \hat{W} | + \rangle \psi_+(\mathbf{r}, t) + \langle - | \hat{W} | - \rangle \psi_-(\mathbf{r}, t) . \end{aligned}$$

Les éléments de matrice de \hat{W} dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ sont des fonctions des variables externes. Ils se rajoutent aux termes de potentiel usuels (termes diagonaux) et couplent en général les deux équations d'évolution des composantes ψ_+ et ψ_- .

6.2 Évolution dans un champ magnétique uniforme

Considérons un atome d'argent en mouvement libre dans le vide, en présence d'un champ magnétique uniforme \mathbf{B} . On suppose qu'à l'instant $t = 0$, la fonction d'onde atomique totale (externe + interne) s'écrit :

$$\psi(\mathbf{r}, 0) (\alpha_0 |+\rangle + \beta_0 |-\rangle) , \quad (8.46)$$

c'est-à-dire qu'elle se factorise dans les variables d'espace et de moment magnétique. L'hamiltonien total contient à la fois l'énergie cinétique de l'atome et l'interaction de son moment magnétique avec le champ \mathbf{B} :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} ; \quad (8.47)$$

(nous omettons à partir de maintenant les opérateurs identité \hat{I}_{int} et \hat{I}_{ext}). A un instant t quelconque, la solution de l'équation de Schrödinger reste factorisée :

$$\psi(\mathbf{r}, t) (\alpha(t)|+) + \beta(t)|-), \quad (8.48)$$

avec :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t), \quad (8.49)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\alpha(t)|+) + \beta(t)|-) = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} (\alpha(t)|+) + \beta(t)|-) . \quad (8.50)$$

En effet, si on suppose que l'état est factorisé comme en (8.48), on vérifie qu'il satisfait l'équation de Schrödinger si (8.49) et (8.50) sont vérifiées. Puisque cet état coïncide avec l'état initial (8.46) à $t = 0$, il constitue bien la solution de l'équation d'évolution.

Il y a donc découplage entre les degrés de liberté internes et externes. La première de ces deux équations décrit l'évolution de la fonction d'onde externe d'atomes libres, étudiée au chapitre 2 (le découplage subsiste en présence d'un potentiel extérieur $V(\mathbf{r})$). La seconde équation détermine l'évolution de l'état interne de l'atome. Si \mathbf{B} est parallèle à z , l'équation (8.50) devient :

$$\begin{cases} i\hbar \dot{\alpha}(t) = -\mu_0 B \alpha(t) \\ i\hbar \dot{\beta}(t) = \mu_0 B \beta(t) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha(t) = \alpha_0 \exp(-i\omega_0 t/2) \\ \beta(t) = \beta_0 \exp(i\omega_0 t/2) \end{cases} \quad (8.51)$$

où l'on a posé $\omega_0 = -2\mu_0 B/\hbar$.

Nous pouvons alors déterminer les valeurs moyennes M_x, M_y, M_z des trois composantes $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z$:

$$\begin{aligned} M_x(t) &= \langle \psi(t) | \hat{\mu}_x | \psi(t) \rangle = 2\mu_0 \alpha_0 \beta_0 \cos \omega_0 t, \\ M_y(t) &= \langle \psi(t) | \hat{\mu}_y | \psi(t) \rangle = 2\mu_0 \alpha_0 \beta_0 \sin \omega_0 t, \\ M_z(t) &= \langle \psi(t) | \hat{\mu}_z | \psi(t) \rangle = \mu_0 (|\alpha_0|^2 - |\beta_0|^2). \end{aligned} \quad (8.52)$$

Nous supposons ici que α_0 et β_0 sont réels, mais le calcul se généralise sans difficulté au cas complexe.

Comme on pouvait s'y attendre à partir du théorème d'Ehrenfest, M_z est indépendante du temps, car $\hat{\mu}_z$ commute avec l'hamiltonien si \mathbf{B} est parallèle à z ; en revanche, M_x et M_y ne sont pas des constantes du mouvement. Pour avoir une image plus intuitive de cette évolution, on peut récrire ces trois

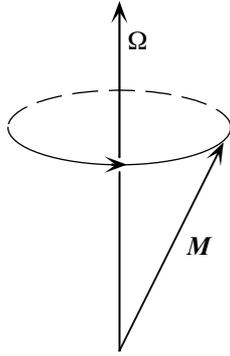


FIG. 8.5: Evolution temporelle des valeurs moyennes des trois composantes du moment magnétique d'un atome d'argent plongé dans un champ magnétique dirigé suivant z . On retrouve un mouvement gyroscopique identique à la précession de Larmor d'un moment magnétique classique plongé dans le même champ.

équations sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{M}_x = -\omega_0 M_y \\ \dot{M}_y = \omega_0 M_x \\ \dot{M}_z = 0 \end{cases} \quad \text{soit} \quad \frac{d\mathbf{M}}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M}, \quad (8.53)$$

avec $\boldsymbol{\Omega} = \omega_0 \mathbf{u}_z$. On retrouve ici le mouvement de précession de Larmor décrit en (8.8) (figure 8.5). Nous verrons au chapitre 12 que cette précession peut être observée expérimentalement et que la fréquence de Larmor peut être mesurée avec une grande précision, par exemple dans des expériences de résonance magnétique. Cette technique est à la base de multiples applications en physique, en chimie, en biologie et en médecine.

6.3 Explication de l'expérience de Stern et Gerlach

Il nous reste à démontrer que le modèle théorique que nous avons construit permet d'expliquer la séparation spatiale observée pour les états $|\pm\rangle_z$. Considérons un jet atomique incident se propageant selon la direction y ; chaque atome possède un moment magnétique. Dans une région de longueur L , on applique un champ magnétique \mathbf{B} parallèle à z avec un gradient dans cette direction :

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = B_z(\mathbf{r})\mathbf{u}_z \quad \text{avec} \quad B_z(\mathbf{r}) = B_0 + b'z. \quad (8.54)$$

Cette hypothèse est en toute rigueur incorrecte puisque le champ \mathbf{B} ne satisfait pas $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. Un calcul plus réaliste s'effectue avec un champ $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{u}_z + b'(z\mathbf{u}_z - x\mathbf{u}_x)$ qui satisfait bien les équations de Maxwell. Si le champ directeur $B_0 \mathbf{u}_z$ est beaucoup plus grand que le champ transverse $-b'x\mathbf{u}_x$ sur l'extension transverse Δx du paquet d'onde atomique (c'est-à-dire $B_0 \gg b'\Delta x$), les états propres de $-\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$ restent pratiquement égaux à $|\pm\rangle_z$ et notre approche continue à s'appliquer.

Dans ces conditions, l'équation de Schrödinger (8.45) se découple en deux équations :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \mu_0 B \right) \psi_+(\mathbf{r}, t) , \quad (8.55)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu_0 B \right) \psi_-(\mathbf{r}, t) . \quad (8.56)$$

Ces deux équations sont chacune du même type que l'équation de Schrödinger vue au chapitre 3, mais le potentiel n'est pas le même pour ψ_+ et ψ_- . Posons :

$$\pi_{\pm} = \int |\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \quad , \quad \pi_+ + \pi_- = 1 , \quad (8.57)$$

où π_+ et π_- sont les probabilités de trouver $\mu_z = +\mu_0$ et $\mu_z = -\mu_0$. A partir de (8.55) et (8.56), nous déduisons que :

$$(d/dt)\pi_+ = (d/dt)\pi_- = 0 \quad . \quad (8.58)$$

Définissons les quantités :

$$\phi_{\pm}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) / \sqrt{\pi_{\pm}} , \quad (8.59)$$

qui sont les amplitudes de probabilité *conditionnelles* des particules pour lesquelles $\mu_z = \pm\mu_0$. Ces fonctions d'onde normalisées vérifient également (8.55).

Posons maintenant :

$$\langle \mathbf{r}_{\pm} \rangle = \int \mathbf{r} |\phi_{\pm}(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r , \quad (8.60)$$

$$\langle \mathbf{p}_{\pm} \rangle = \int \phi_{\pm}^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \phi_{\pm}(\mathbf{r}, t) d^3r , \quad (8.61)$$

où $\langle \mathbf{r}_+ \rangle$ (resp. $\langle \mathbf{r}_- \rangle$) est la position moyenne des particules pour lesquelles $\mu_z = +\mu_0$, (resp. $\mu_z = -\mu_0$), et $\langle \mathbf{p}_{\pm} \rangle$ leurs impulsions moyennes. Une simple application du théorème d'Ehrenfest donne :

$$(d/dt)\langle \mathbf{r}_{\pm} \rangle = \langle \mathbf{p}_{\pm} \rangle / m \quad (8.62)$$

$$(d/dt)\langle p_{x_{\pm}} \rangle = (d/dt)\langle p_{y_{\pm}} \rangle = 0 \quad (8.63)$$

$$(d/dt)\langle p_{z_{\pm}} \rangle = \pm\mu_0 b' \quad . \quad (8.64)$$

A $t = 0$, nous supposons que :

$$\langle \mathbf{r}_{\pm} \rangle = 0 \quad \langle p_{x_{\pm}} \rangle = \langle p_{z_{\pm}} \rangle = 0 \quad \langle p_{y_{\pm}} \rangle = mv \quad .$$

Nous obtenons à l'instant t :

$$\langle x_{\pm} \rangle = 0 \quad \langle y_{\pm} \rangle = vt \quad \langle z_{\pm} \rangle = \pm\mu_0 b' t^2 / 2m \quad . \quad (8.65)$$

Il y a par conséquent séparation *spatiale* le long de z du faisceau initial en deux faisceaux, l'un correspondant à $\mu_z = +\mu_0$, l'autre à $\mu_z = -\mu_0$. A la sortie de l'aimant de longueur L , cette séparation est :

$$\delta z = \langle z_+ \rangle - \langle z_- \rangle = \frac{\mu_0 b'}{m} \frac{L^2}{v^2} . \quad (8.66)$$

Si le gradient de champ est suffisamment fort pour que $\delta z > \Delta z$, c'est-à-dire que la séparation est plus grande que l'extension spatiale de chacun des faisceaux, on aura donc deux faisceaux, l'un dans l'état de moment magnétique $|+\rangle$, l'autre dans l'état $|-\rangle$. Notre formalisme permet donc de décrire complètement les résultats de l'expérience de Stern et Gerlach. Il met en relief deux aspects fondamentaux de la mesure en physique quantique :

- une mesure nécessite une extension spatiale finie : ($\delta z = 0$ dans (8.66) si $L = 0$);
- une mesure n'est jamais instantanée ($\delta z = 0$ si $T = L/v = 0$).

Ces deux aspects sont absents de la formulation des principes de la mécanique quantique présentée au chapitre 5.

Finalement, l'examen de l'évolution temporelle de la séparation moyenne entre les deux taches conduit au résultat suivant. Notons $T = L/v$ le temps passé par les atomes dans le champ magnétique inhomogène, et $E_\perp = \langle p_z^2 \rangle / 2m$ l'énergie transverse communiquée aux atomes par le gradient de champ. Pour observer la séparation, la condition suivante doit être remplie :

$$T E_\perp \geq \hbar/2 .$$

Cette condition, où le gradient de champ a disparu, constitue un aspect important de la relation d'incertitude *temps-énergie* qui apparaît dans toute mesure quantique. Nous reviendrons sur cette relation au chapitre 17.

7 Conclusion

Nous avons proposé ici une description quantique qui rend compte de l'ensemble des phénomènes observés dans l'expérience de Stern et Gerlach menée avec des atomes d'argent (ou plus généralement des atomes à « deux taches »). Notre démarche pourrait être généralisée à d'autres classes d'atomes pour lesquels trois, quatre,... taches sont observées expérimentalement. Pour la classe des atomes « à trois taches » par exemple, il y a trois valeurs possibles $+\mu_0, 0, -\mu_0$ de la composante suivant z du moment magnétique. En considérant diverses combinaisons de mesures, on construirait les observables $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$ dans la base $|+\rangle_z, |0\rangle_z, |-\rangle_z$, autrement dit dans un espace à trois dimensions.

En fait, cette démarche se révèle fastidieuse pour des dimensions de $\mathcal{E}_{\text{interne}}$ supérieures à 2, et nous lui préférons dans la suite une approche plus générale, fondée sur la relation fondamentale entre moment magnétique et moment cinétique. Nous verrons alors que les relations de commutations (8.25), trouvées ici phénoménologiquement, ont un caractère beaucoup plus général.

Pour en savoir plus

Space Quantization : Otto Stern's Luck Star, par B. Friedrich and D. Herschbach, Daedalus, **127**, p. 165 (1998). Voir aussi M. Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1966); B.L. Van Der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1967); J. Mehra and H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, Springer-Verlag, Berlin (1982).

Exercices

1. Détermination de l'état magnétique d'un atome d'argent. On considère un atome d'argent dans un état de moment magnétique arbitraire :

$$\alpha|+\rangle_z + \beta|-\rangle_z \quad \text{avec} \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (8.67)$$

- Montrer qu'il s'agit d'un état propre de $\mathbf{u} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}$ avec la valeur propre $+\mu_0$ pour un vecteur unitaire \mathbf{u} dont on précisera la direction.
- Alice fournit à Bernard *un* atome d'argent dans un état de moment magnétique *a priori* inconnu du type (8.67). Bernard peut-il déterminer cet état, par des mesures de type Stern et Gerlach ?
- Alice fournit maintenant à Bernard N ($\gg 1$) atomes d'argent, tous préparés dans le même état (8.67). Indiquer une stratégie possible pour que Bernard détermine (de manière approchée) cet état.

2. Mesures répétées; paradoxe de Zénon quantique. Le moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ d'un neutron peut se décrire de la même façon que le moment magnétique d'un atome d'argent dans l'expérience de Stern et Gerlach. Si un neutron est placé dans un champ uniforme \mathbf{B} parallèle à l'axe z , il peut être représenté par un système à deux états en ce qui concerne les mesures de moment magnétique (en oubliant les variables d'espace).

Notons $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les états propres de l'observable $\hat{\mu}_z$. Ces états propres correspondent aux deux valeurs propres $+\mu_0$ et $-\mu_0$. L'hamiltonien du système placé dans un champ \mathbf{B} est $\hat{H} = -B\hat{\mu}_z$. On pose $\omega = -2\mu_0 B/\hbar$.

- Rappeler les niveaux d'énergie du système.
- A l'instant $t = 0$ le neutron est préparé dans l'état : $|\psi(0)\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$. Quels résultats peut-on obtenir en mesurant μ_x , avec quelles probabilités ?
- Ecrire l'état $|\psi(T)\rangle$ du moment magnétique à un instant T .
- On mesure μ_x à l'instant T . Quelle est la probabilité de trouver $+\mu_0$?
- On effectue maintenant sur le même système une séquence de N mesures successives aux instants $t_p = pT/N$ $p = 1, 2, \dots, N$. Quelle est la probabilité que toutes ces mesures donnent le résultat $\mu_x = +\mu_0$?
- Que devient cette probabilité quand $N \rightarrow \infty$? Interpréter ce résultat ; est-il raisonnable physiquement ?

Annexe B: Demo du Hamiltonien d'interaction lumière-matière.

1 Hamiltonien d'interaction

Le but de cette section est de justifier l'hamiltonien décrivant l'interaction lumière-matière. On commence par établir l'équivalence du couplage minimal et de la force de Lorentz classique. On discute ensuite de l'invariance de jauge et de la manière générale d'introduire le champ électromagnétique dans un système matériel. Enfin, on introduit la notion de courant paramagnétique, essentielle à la description de l'interaction entre le champ électromagnétique quantifié et la matière qui n'est pas deuxième-quantifiée.

1.1 Force de Lorentz

En présence de champs électrique et magnétique, une particule de charge électrique q (pour un électron $q = -e$ ($e > 0$))¹ subit, en physique classique, une force donnée par la formule de Lorentz

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}. \quad (1)$$

Le but de cette section est de démontrer que le lagrangien qui conduit à cette formule a la forme suivante:

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + q\vec{A} \cdot \vec{v} - qU \quad (2)$$

où \vec{A} est le potentiel vecteur et U le potentiel scalaire électrique.

¹Ici, pour simplifier on ne considère que le cas d'une particule soumise à un champ électromagnétique $(\vec{E}(\vec{r}, t), \vec{B}(\vec{r}, t))$.

Pour démontrer cela, calculons d'abord le moment conjugué ($p_j = \frac{\partial L}{\partial v_j}$):

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A}. \quad (3)$$

Notons que ce moment conjugué n'est plus égal à la quantité de mouvement $m\vec{v}$. L'équation de Lagrange est alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_i} \right) &= \frac{\partial L}{\partial x_i} \\ \frac{dA_i}{dt} &= \frac{\partial A_i}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} \\ \dot{p}_i &= m\dot{v}_i + q \left\{ \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} \right\} \\ &= \frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \frac{\partial U}{\partial x_i} + qv_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (4)$$

(la convention de sommation sur les indices répétés est utilisée. C'est la convention d'Einstein). Cette équation peut aussi s'écrire (on utilise la convention $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$)

$$\begin{aligned} m\dot{v}_i &= q \left(-\partial_i U - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + q(v_j \partial_i A_j - v_j \partial_j A_i) \\ &= qE_i + q\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm}v_j \partial_l A_m \\ &= qE_i + q(\vec{v} \times \vec{B})_i \end{aligned} \quad (5)$$

où nous avons utilisé les expressions $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ et $\vec{E} = -\vec{\nabla}U - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ des champs en fonction des potentiels. Nous retrouvons donc la force de Lorentz, ce qui prouve la légitimité du lagrangien (2). $\epsilon_{klm} = \pm 1$ pour les permutations paires (+1) et impaires (-1) des indices klm .

L'hamiltonien *classique* associé à ce lagrangien se trouve de la manière habituelle:

$$\begin{aligned} H &= \vec{p} \cdot \vec{v} - L \\ &= \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + qU \\ &= \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + qU. \end{aligned} \quad (6)$$

En mécanique quantique, il faut remplacer \vec{p} par l'opérateur correspondant \hat{P} et remplacer l'argument \vec{r} de \vec{A} par l'opérateur de position \hat{R} (*attention*: \vec{r} désigne le vecteur position de la particule en non pas la position à laquelle on évalue le potentiel vecteur)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{P} - q\vec{A}(\hat{R}) \right]^2 + qU(\hat{R}). \quad (7)$$