

Etude De l'Hamiltonien De Particule Plongée Dans Un Champ Magnétique Et Hamiltonien De Spin d'Eu²⁺ Dans Un Cristal Du Type AMX₃ Cscdeu²⁺

[Study Of The Hamiltonian Of Particles Immersed In A Magnetic Field And Spin Hamiltonian Of Crystals Of Perovskite AMX₃ Or Cscdeu²⁺ Type]

Rodel Justola TSIAFITAKA¹, Briant KALL², Jean Victor RANDRIANOHAVY³

¹Ecole Doctorale Thématique EDT, Faculté des Sciences à l'Université d'Antsiranana

²Professeur Titulaire à l'Université d'Antsiranana Madagascar, Faculté des Sciences

³Maitre de conférence à l'Université d'Antsiranana Madagascar, Faculté des Sciences

Corresponding Author: Rodel Justola TSIAFITAKA; t.rodeljustola@yahoo.fr



Abstract – The Hamiltonian of particles immersed in a magnetic field includes terms for kinetic and potential energies and for interactions with the magnetic field, often modolled by the Zeeman effect. Variatons in the velocity and position of particles modify their magnetic moment and energy levels and affecting properties.

In this article, we present together the preliminary results obtained in the study of CsCdBr₃ doped with the Eu²⁺ ion. CsCdBr₃, due to its one-dimensional nature, is an ideal material for studying energy localization in heavily doped materials because of the weak interactions between ions

The study of the spin Hamiltonian for the Eu²⁺ ion in the CsCdEu²⁺ crystal considers the impact of several effects. The Zeeman Effect separates the spin energy levels under the influence of an external magnetic field modifying the spectroscopic transitions .The fine structure, resulting from the spin orbit interaction, adjusts the energy levels according to the spin-orbit couplings within the crystal. The hyperfine structure, due to interactions between the nuclear spin and the electronic magnetic moment.

The comparative study of particle and spin Hamiltonians in the crystalline metal CsCdEu²⁺ reveals the importance of complex quantum interactions in determining the material's physical properties.

Keywords – Hamiltonian, Particle, Crystal, Velocity, Spin, Fine Structure, Hyperfine Structure, Magnetic Field

Résumé – L'hamiltonien de particules plongées dans un champ magnétique inclut des termes pour les énergies cinétiques et potentielles ainsi que pour les interactions avec le champ magnétique, souvent modélisées par l'effet Zeeman. Les variations de vitesse et de position des particules modifient leur moment magnétique et leur énergie, entraînant des décalages dans les niveaux d'énergie et affectant les propriétés.

Dans le présent article, nous réunions les résultats préliminaires obtenus dans l'étude de CsCdBr₃ dopé avec l'ion Eu²⁺. CsCdBr₃, du fait de son caractère unidimensionnel, est un matériau idéal pour l'étude de la localisation de l'énergie dans les matériaux fortement dopés, en raison des interactions faibles entre les ions.

L'étude de l'Hamiltonien de spin pour l'ion Eu²⁺ dans le cristal CsCdEu²⁺ considère l'impact de plusieurs effets. L'effet Zeeman sépare les niveaux d'énergie du spin sous l'influence d'un champ magnétique externe, modifiant les transitions spectroscopiques. La structure fine, résultant de l'interaction spin-orbite, ajuste les niveaux d'énergie en fonction des couplages spin-orbite au sein du cristal. La structure hyperfine, due aux interactions entre le spin nucléaire et le moment magnétique électronique.

L'étude comparative des Hamiltoniens de particules et de spin dans le métal cristallin CsCdEu²⁺ révèle l'importance des interactions quantiques complexes dans la détermination des propriétés physiques du matériau.

Mots Clés – Hamiltonien, Particule, Cristal, Vitesse, Spin, Structure Fin, Structure Hyperfine, Champ Magnétique.

I. INTRODUCTION

L'étude des particules et des cristaux, ces structures ordonnées et fascinantes, constitue un domaine de recherche essentiel en physique, où la mécanique quantique joue un rôle important [1]. Dans cette introduction, nous plongerons dans le monde étonnant des cristaux $CsCdBr_3$ et $CsCdEu^{2+}$ explorant comment les principes de la mécanique quantique sont appliqués pour comprendre leurs propriétés et leurs alignements. Ces cristaux, composés de césium, cadmium et de bromure ou d'europium, présentent un domaine large pour étudier les phénomènes quantiques à l'échelle microscopique [2]. En examinant comment ces outils théoriques et mathématiques sont utilisés pour sonder la structure et le comportement de ces matériaux cristallins, nous découvrirons l'importance de cette recherche pour la science des matériaux, la photonique et même l'informatique quantique.

L'exploration de l'hamiltonien de particules plongé dans un champ magnétique, des propriétés nucléaires et cristallines des matériaux ouvre une fenêtre sur un monde complexe où la physique nucléaire et la science des matériaux se rencontrent [3], [4]. Ces cristaux, offrent un terrain d'étude unique où les interactions entre les noyaux atomiques et la matrice cristalline sont intéressantes pour comprendre leurs propriétés physiques [5]. L'objectif de cet article consiste à étudier l'hamiltonien de la particule et celui de spin des cristaux en discutant leur effet aux éléments constitutifs de leurs formules. En explorant les méthodes et les théories de la physique utilisées pour analyser ces matériaux, nous découvrirons comment les outils de la mécanique quantique peuvent-ils être combinés pour étudier en profondeur les structures cristallines complexes de $CsCdBr_3$ et $CsCdEu^{2+}$, et quels renseignements peuvent-ils fournir sur la nature des interactions atomiques dans ces matériaux puis envers l'hamiltonien de particule plongé dans un champ magnétique? Comment la physique nucléaire peut-elle être utilisée pour sonder les structures cristallines complexes des matériaux comme $CsCdBr_3$ et $CsCdEu^{2+}$, et quelles informations peut-elle révéler sur leurs propriétés physiques fondamentales ?

Le présent article est divisé en trois grandes parties portant respectivement la partie introductive et la généralité. Ensuite, on décrira, les rappels classiques et théoriques et les méthodologies utilisées. Enfin, on consacra la dernière partie sur la présentation des résultats et discussion.

II. METHODOLOGIE

1. Hamiltonien de spin et spectre résonance paramagnétique électronique

1.1. Résonance paramagnétique électronique

La **résonance paramagnétique électronique (RPE)**, **résonance de spin électronique (RSE)**, ou en anglais *electron spin resonance (ESR)* désigne la propriété de certains électrons à absorber, puis réémettre l'énergie d'un rayonnement électromagnétique lorsqu'ils sont placés dans un champ magnétique [6]. Cette propriété est analogue à celle des noyaux atomiques en résonance magnétique nucléaire (RMN). Seuls les électrons non-appariés (ou électrons célibataires), présents dans des espèces chimiques radicalaires ainsi que dans les sels et complexes des métaux de transition, présentent cette propriété [7], [8].

Ce phénomène est utilisé dans la spectroscopie par résonance paramagnétique électronique. Celle-ci permet de mettre en évidence la présence d'électrons non-appariés dans des solides, des liquides ou des gaz et de déterminer l'environnement de ces derniers. Il sera possible, par exemple, de connaître le type de noyaux atomiques à proximité de ces électrons non-appariés et d'en déduire éventuellement la structure d'une molécule. Par ailleurs, du fait de l'importance du moment magnétique de spin de l'électron, cette technique est également très sensible [9].

1.2. Expression du l'hamiltonien

L'hamiltonien de spin est un hamiltonien phénoménologique permettant l'interprétation des spectres de Résonance Paramagnétique Electronique (R.P.E.) [10]. Dans le cas d'ions paramagnétiques, l'hamiltonien le plus général comporte le terme d'interaction Zeeman, les termes de champ cristallin (structure fine), les termes de structure hyperfine (interaction entre les spins nucléaire et électronique de l'ion considéré), les termes de structure superhyperfine (interaction entre les spins nucléaires des ligands et le spin électronique de la sonde) [11]. Comme les structures superhyperfines ne sont pas résolues, elles ne sont prises en compte. Elles contribuent à l'élargissement des raies de résonance et diminuent la précision de la détermination de la position des raies [12].

Dans cette étude, on a considéré l'hamiltonien de spin suivant :

$$H = \beta [g] \vec{H} \vec{S} + \sum_{n=2}^{2s} \sum_{m=-n}^n b_n^m O_n^m \quad (1)$$

Le premier terme correspond à l'interaction Zeeman, le second caractérise l'interaction du spin électronique avec le champ cristallin exprimé avec le formalisme des opérateurs de Stevens. Cette interaction est à courte portée.

[g] est le tenseur de Landé qui, en symétrie axiale, a la forme suivante :

$$[g] = \begin{pmatrix} g_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & g_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & g_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Les indices // et \perp font référence à l'axe de symétrie du défaut magnétique.

β : le magnéton de Bohr.

\vec{S} : l'opérateur de spin de composantes S_x, S_y et S_z

H : le champ variable.

Les transitions permises entre deux niveaux d'énergie parmi un ensemble de $(2S+1)$ niveaux correspondant à $\Delta M_S = \pm 1$ et exigent un quantum d'énergie $h\nu = g\beta H$ [13].

Les O_n^m sont les opérateurs tensoriels de Stevens et s'expriment en fonction de S_x, S_y et S_z (voir tableau). Leurs éléments de matrice sont diagonaux pour $m = 0$ et non – diagonaux pour $m \neq 0$.

Les b_n^m sont des paramètres traduisant la levée de dégénérescence des niveaux d'énergie en champ nul. Ils caractérisent l'influence du champ cristallin sur l'ion paramagnétique.

Dans une étude R.P.E., les mesures des positions en champs magnétiques des raies d'absorption, pour diverses orientations du champ magnétique, permettent de déterminer les différents paramètres de l'Hamiltonien de spin [14], [15]. Le nombre de paramètres b_n^m à déterminer est limité : dans la sommation, on ne tient compte que des valeurs paires de n, les autres étant nulles à cause de l'invariance de l'hamiltonien par renversement du temps. De plus, les termes d'indice n supérieur à 2s sont nuls. La symétrie du champ cristallin au niveau du site de l'ion paramagnétique conditionne le nombre des termes non nuls. Enfin, les termes correspondant aux valeurs négatives de m peuvent s'éliminer si le système d'axes dans lequel on procède aux calculs est convenablement choisi.

Dans le système de basse symétrie, le couplage entre des niveaux autres que ceux correspondant à $\Delta M_S = \pm 1$ peut induire des transitions normalement interdites. Leur intensité généralement assez faible permet leur identification [16], [17].

Tableau 1: Operateurs tensoriels de STEVENS

TABLEAU 1 : OPERATEURS TENSORIELS DE STEVENS avec $S_+ = S_x + iS_y$ et $S_- = S_x - iS_y$
$O_2^0 = 3 S_z^2 - S(S+1)$
$O_2^1 = \frac{1}{4} [S_z (S_+ + S_-) + (S_+ + S_-) S_z]$
$O_2^2 = \frac{1}{2} (S_+^2 + S_-^2)$

$O_4^0 = 35 S_+^0 - 30 S(S+1)S_z^2 + 25 S_z^2 - 6 S(S+1) + 3 S^2 (S+1)^2$
$O_4^1 = \frac{1}{4} \left[\left\{ 7 S_z^3 - (35(S+1) + 1) S_z \right\} (S_+ + S_-) + (S_+ + S_-) \left\{ 7 S_z^3 - (35(S+1) + 1) S_z \right\} \right]$
$O_4^2 = \frac{1}{4} \left[\left\{ 7 S_z^2 - S(S+1) + 1 \right\} (S_+^2 + S_-^2) + (S_+^2 + S_-^2) \left\{ 7 S_z^2 - S(S+1) - 5 \right\} \right]$
$O_4^3 = \frac{1}{4} \left[S_z (S_+^3 + S_-^3) + (S_+^3 + S_-^3) S_z \right]$
$O_4^4 = \frac{1}{2} (S_+^4 + S_-^4)$
$O_6^0 = 231 S_z^6 - 315 S(S+1) S_z^4 + 105 S^2 (S+1)^2 S_z^2 + 294 S_z^2 - 525 S(S+1) S_z^2 - 5 S^3 (S+1)^3 + 40 S^2 (S+1)^2 - 60 S(S+1)$
$O_6^3 = \frac{1}{4} \left[\left\{ 11 S_z^3 - 3 S(S+1) S_z - 59 S_z \right\} (S_+^3 + S_-^3) + (S_+^3 + S_-^3) \left\{ 11 S_z^3 - 3 S(S+1) S_z - 59 S_z \right\} \right]$
$O_6^4 = \frac{1}{4} \left[\left\{ 11 S_z^2 - S(S+1) - 38 \right\} (S_+^4 + S_-^4) + (S_+^4 + S_-^4) \left\{ 11 S_z^2 - S(S+1) - 38 \right\} \right]$
$O_6^6 = \frac{1}{2} (S_+^6 + S_-^6)$

2. Propriété quantique d'une particule dans un champ magnétique

Les propriétés d'une particule soumise à l'action d'un potentiel scalaire ont été étudiées, dans certains cas particuliers, au début de cours de mécanique quantique [18]. On s'intéresse à un problème complémentaire, celui des propriétés d'une particule soumise à l'action d'un potentiel vecteur, c'est-à-dire, d'une particule chargée plongée dans un champ magnétique. On rencontre un certain nombre d'effets purement quantiques, tels que l'existence, lorsque le champ magnétique est uniforme, de niveaux d'énergie équidistants (niveaux de Landau) [19].

2.1. Mouvement de la particule

Lorsqu'une particule de position et de charge q est soumise à l'action d'un champ magnétique, la force F qui s'exerce sur elle est donnée par la loi de Laplace :

$$\vec{F} = q \vec{v} \wedge \vec{B}(\vec{r}) \quad (3)$$

Où $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ est la vitesse de la particule.

Son mouvement obéit à la loi fondamentale de la dynamique :

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}, \text{ m étant sa masse.}$$

Dans la suite de ce complément, on considère souvent le cas où le champ magnétique est uniforme : on prendra alors que sa direction est portée sur l'axe O_z .

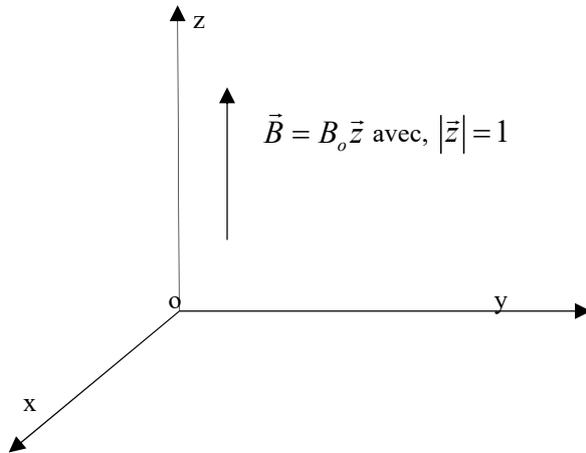


Figure 1: Présentation du champ magnétique B dans le repère de l'espace

2.2. Pote

Pour décrire le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r})$, on peut utiliser un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$ qui, par définition, est relié à $\vec{B}(\vec{r})$ par la relation : $\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \wedge \vec{A}(\vec{r})$

Si le champ $\vec{B}(\vec{r})$ est uniforme, on peut prendre :

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \vec{r} \wedge \vec{B}(\vec{r}) \quad (4)$$

2.3. Formalisme Lagrangien

La fonction de Lagrange ou Lagrangien est donnée par la relation de la forme :

$$L(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m \dot{r}_i^2 - V(\vec{r}) = T - V \quad (5)$$

La fonction de Lagrange $L(\vec{r}, \vec{v}, t)$ de la particule s'écrit :

$$L(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + q \vec{v} \wedge \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (6)$$

où $\vec{A}(\vec{r})$ est un potentiel vecteur constant dans le temps.

L'impulsion, moment conjugué de la position \vec{r} dont on aura besoin dans le cadre de la formulation de l'hamiltonien et donc de la mécanique quantique, est reliée à \vec{v} et $\vec{A}(\vec{r}, t)$ par la relation [20]:

$$\vec{p} = \nabla_{\vec{v}} \cdot L(\vec{r}, \vec{v}) \Rightarrow \vec{p} = m \vec{v} + q \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (7)$$

La fonction de l'hamiltonien $H(\vec{r}, \vec{p})$ s'écrit alors :

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \vec{p} \cdot \vec{r} - L = \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2} m \dot{r}^2 - q \vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$$

$$\text{avec } \vec{r} = \frac{1}{m} \left[\vec{p} - q \vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \right]$$

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}}{m} (\vec{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t)) - \frac{1}{2} m \frac{1}{m^2} (\vec{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t))^2 - \frac{q}{m} (\vec{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t)) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\bar{p}^2}{m} - \frac{2q}{m} \bar{p} \bar{A}(\vec{r}, t) + \frac{q^2}{m} \bar{A}^2(\vec{r}, t) - \frac{1}{2m} (\bar{p} - q \bar{A}(\vec{r}, t))^2 \\
 &= \frac{1}{m} (\bar{p} - q \bar{A}(\vec{r}, t))^2 - \frac{1}{2m} (\bar{p} - q \bar{A}(\vec{r}, t))^2
 \end{aligned}$$

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} (\bar{p} - q \bar{A}(\vec{r}, t))^2 \tag{8}$$

Il sera commode par la suite de poser :

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = H_{\perp}(\vec{r}, \vec{p}) + H_{\parallel}(\vec{r}, \vec{p})$$

$$H_{\perp}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} \{ (p_x - q \bar{A}_x(\vec{r}))^2 + (p_y - q \bar{A}_y(\vec{r}))^2 \}$$

$$H_{\parallel}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} (p_z - q \bar{A}_z(\vec{r}))^2$$

III. RESULTATS ET DISCUSSIONS

3. Application de la mécanique quantique

3.1. Mécanique quantique

L'hamiltonien en mécanique quantique s'obtient à l'aide du principe de correspondance.

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}, \vec{r} \rightarrow \vec{R}$$

On considère une particule plongée dans un champ magnétique quelconque $\vec{B}(\vec{r})$ décrit par un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$. En mécanique quantique, le potentiel vecteur devient un opérateur, fonction de trois variables X, Y et Z. L'opérateur H, hamiltonien de la particule, s'obtient à partir de la relation établie ci-dessus [21].

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}))^2 \quad (9)$$

L'opérateur \vec{V} associée à la vitesse de la particule est donnée par :

$$\vec{V} = \frac{1}{m}(\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R})) \quad (10)$$

$$\text{Ce qui permet d'écrire H sous la forme : } H = \frac{1}{2}m\vec{V}^2 \quad (11)$$

3.2. Relations de commutation

Les observables \vec{R} et \vec{P} vérifient les relations de commutation canonique :

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \quad (12)$$

Les autres commutateurs entre les composantes de \vec{R} et \vec{P} sont nuls. Deux composantes de \vec{P} commutent entre elles, par contre, on voit qu'il n'est pas de même pour \vec{V} .

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{1}{m}(P_x - qA_x(\vec{R})), V_y = \frac{1}{m}(P_y - qA_y(\vec{R})) \text{ et } V_z = \frac{1}{m}(P_z - qA_z(\vec{R})) \\ [V_x, V_y] &= V_x V_y - V_y V_x \\ &= \frac{1}{m^2} [P_x - qA_x(\vec{R})][P_y - qA_y(\vec{R})] - [P_y - qA_y(\vec{R})][P_x - qA_x(\vec{R})] \\ &= \frac{1}{m^2} (P_x P_y - P_y P_x) - \frac{1}{m^2} (P_x A_y(\vec{R}) - A_y(\vec{R}) P_x) - \frac{q}{m^2} [A_x(\vec{R}) P_y - P_y A_x(\vec{R})] \\ &\quad + \frac{q^2}{m^2} [A_x(\vec{R}) A_y(\vec{R}) - A_y(\vec{R}) A_x(\vec{R})] \\ &= \frac{1}{m^2} [P_x, P_y] - \frac{q}{m^2} [P_x, A_y(\vec{R})] - \frac{q}{m^2} [A_x(\vec{R}), P_y] + \frac{q^2}{m^2} [A_x(\vec{R}), A_y(\vec{R})] \\ &= 0 - \frac{q}{m^2} [P_x, A_y(\vec{R})] - \frac{q}{m^2} [A_x(\vec{R}), P_y] + 0 \\ [V_x, V_y] &= -\frac{q}{m^2} \{ [P_x, A_y(\vec{R})] + [A_x(\vec{R}), P_y] \} \end{aligned} \quad (13)$$

On veut exploiter davantage cette relation :

$$[P, F(x)] = [P, X]F'(X) = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial X} \quad \text{et} \quad [X, G(P)] = [X, P]G'(X) = i\hbar \frac{\partial G}{\partial P}$$

$$[P_x, A_y(\vec{R})] = [P_x, X] \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial X} = -i\hbar \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial X}$$

$$[A_x(\vec{R}), P_y] = [Y, P_y] \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Y} = i\hbar \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Y}$$

$$[V_z, V_y] = -\frac{q}{m^2} \left[-i\hbar \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial X} + i\hbar \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Y} \right]$$

$$[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} \left[\frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial X} - \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Y} \right] \quad (14)$$

On veut exprimer cette dernière relation en fonction des composantes de

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{R})$$

$$\vec{B}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial A_z(\vec{R})}{\partial Y} - \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial Z} \\ \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Z} - \frac{\partial A_z(\vec{R})}{\partial X} \\ \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial X} - \frac{\partial A_x(\vec{R})}{\partial Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_x(\vec{R}) \\ B_y(\vec{R}) \\ B_z(\vec{R}) \end{pmatrix}$$

$$[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} B_z(\vec{R}) \quad (15)$$

$$[V_y, V_z] = \frac{1}{m^2} \{ [P_y - q A_y(\vec{R})], [P_z - q A_z(\vec{R})] \}$$

$$= \frac{1}{m^2} [P_y, P_z] - \frac{q}{m^2} [P_y, A_z(\vec{R})] - \frac{q}{m^2} [A_y(\vec{R}), P_z] + \frac{q^2}{m^2} [A_y(\vec{R}), A_z(\vec{R})]$$

$$[V_y, V_z] = -\frac{q}{m^2} \{ [P_y, A_z(\vec{R})] + [A_y(\vec{R}), P_z] \}$$

$$= -\frac{q}{m^2} \left\{ P_y, Y \right\} \frac{\partial A_z(\vec{R})}{\partial Y} + [Z, P_z] \frac{\partial A_y(\vec{R})}{\partial Z} \}$$

$$[V_y, V_z] = \frac{i\hbar q}{m^2} B_x(\vec{R}) \quad (16)$$

En effectuant le même principe de calcul, on trouve :

$$[V_z, V_x] = \frac{i\hbar q}{m^2} B_y(\vec{R}) \quad (17)$$

Les autres relations de commutation ont pour expression :

$$\vec{V} = \frac{1}{m} (\vec{P} - q \vec{A}(\vec{R})), \quad V_x = [P_x - q A_x(\vec{R})], \quad V_y = [P_y - q A_y(\vec{R})] \quad \text{et} \quad V_z = [P_z - q A_z(\vec{R})]$$

$$[X, V_x] = \frac{1}{m} [X, P_x - q A_x(\vec{R})] = \frac{1}{m} [X, P_x] - \frac{q}{m} [X, A_x(\vec{R})] = \frac{1}{m} i\hbar + 0$$

$$[X, V_x] = \frac{i\hbar}{m} \quad (18)$$

$$[Y, V_y] = \frac{1}{m} [Y, P_y - q A_y(\vec{R})] = \frac{1}{m} [Y, P_y] - \frac{q}{m} [Y, A_y(\vec{R})] = \frac{1}{m} i\hbar + 0$$

$$[Y, V_y] = \frac{i\hbar}{m}$$

$$[Z, V_z] = \frac{i\hbar}{m} \quad (19)$$

Les relations de commutation entre une composante de \vec{R} et une composante de \vec{V} sont nuls.

On cherche ensuite la relation d'incertitude de Heisenberg. On note la fonction d'onde $\Psi(\vec{R})$ et la fonction $\varphi(\vec{R})$.

On utilise la relation établie ci-dessus de la forme : $A_z = m (X V_y - Y V_x)$

$$[A_x, A_y] = m^2 \left[-\frac{i\hbar}{m^2} V_z + \frac{i\hbar q}{m^2} Z \vec{R} \vec{B}(\vec{R}) \right]$$

$$[A_x, A_y] = i\hbar [V_z + q Z \vec{R} \vec{B}(\vec{R})] \quad (20)$$

$$[A_y, A_z] = i\hbar [V_x + q X \vec{R} \vec{B}(\vec{R})] \quad (21)$$

Avec la même démarche de calcul, on obtient :

$$[A_z, A_x] = i\hbar [V_y + q Y \vec{R} \vec{B}(\vec{R})] \quad (22)$$

Lorsque le champ \vec{B} n'est pas nul, les relations de commutation de \vec{A} sont complètement différents de celles de \vec{L} . L'opérateur \vec{A} ne possède donc pas a priori, les propriétés des moments cinétiques.

3.3. Valeurs propres de l'hamiltonien

En se référant à l'expression de la fonction hamiltonien $H(\vec{r}, \vec{p})$, on peut l'écrire de la forme :

$$H = H_{\perp} + H_{\parallel}$$

Avec :

$$H_{\perp} = \frac{m}{2} (V_x^2 + V_y^2) \text{ et } H_{\parallel} = \frac{m}{2} V_z^2 \quad (23)$$

Lorsque le champ magnétique est uniforme, l'étude générale qu'on a effectuée ne peut aisément poussée plus loin. On choisit la direction du champ magnétique \vec{B} parallèle à l'axe Oz . Les relations de commutation déterminée précédemment deviennent alors :

$$[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} B_z(\vec{R}), \quad [V_y, V_z] = [V_z, V_x] = 0$$

On en déduit la relation suivante : $[H_{\perp}, H_{\parallel}] = 0$

On peut alors chercher une base orthonormée de vecteurs propres communs à H_{\perp} (valeurs propres E_{\perp}) et à H_{\parallel} (valeurs propres E_{\parallel}) ; ils seront automatiquement vecteurs propres de H , avec les valeurs propres : $E = E_{\perp} + E_{\parallel}$

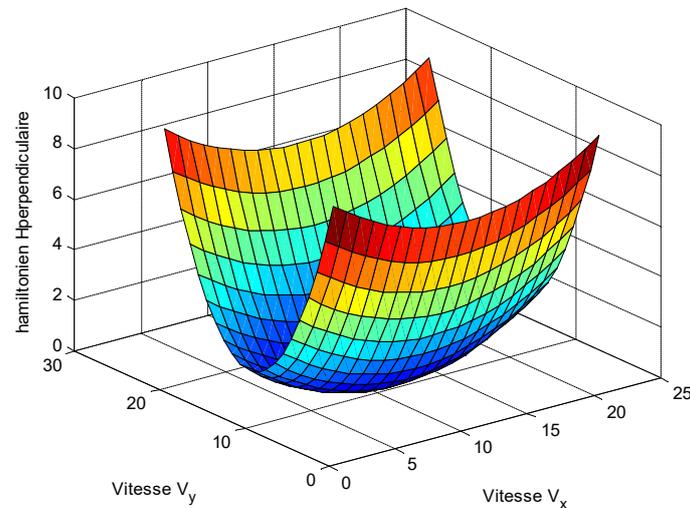


Figure 2: Représentation graphique du Hamiltonien H_{\perp}

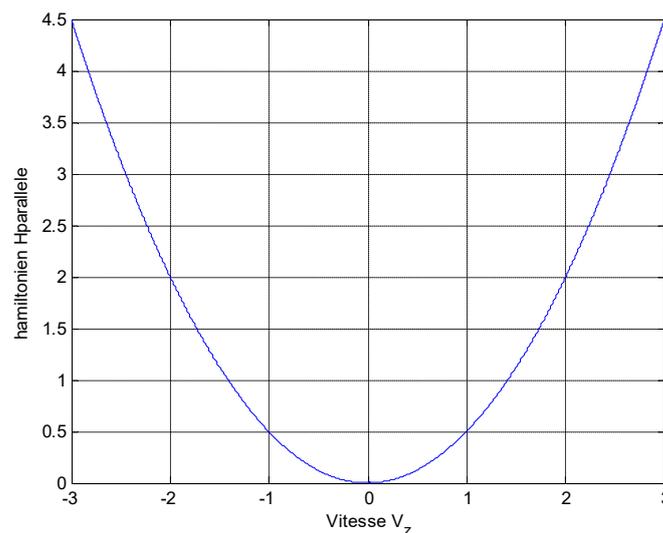


Figure 3: Représentation graphique du Hamiltonien $H_{//}$

On constate que la courbe de la figure 7 sous forme de surface montre comment le Hamiltonien hyperquadrique varie en fonction des vitesses (V_x) et (V_y). Les zones rouges indiquent des valeurs élevées du Hamiltonien, correspondant à des états de haute énergie ou potentiellement instables du système. En revanche, les zones bleues représentent des valeurs plus basses du Hamiltonien, suggérant des états de basse énergie ou des configurations plus stables. Les deux formes paraboliques concaves vers le bas indiquent que le Hamiltonien atteint des valeurs maximales à certains points et diminue en s'éloignant de ces points et la courbe de la figure 8 sous forme de parabole de l'expression de l'Hamiltonien en fonction des vitesses de particule. Il est utile de commencer par examiner l'expression générale de l'Hamiltonien en mécanique classique pour deviner l'établissement de l'Hamiltonien en mécanique quantique.

3.4. Valeurs propres de $H_{//}$

Les vecteurs propres de l'opérateur V_z sont également vecteurs propres de $H_{//}$. Or Z et V_z sont deux opérateurs hermétiques vérifiant la relation :

$$[Z, V_z] = \frac{i\hbar}{m} \quad (24)$$

On peut donc leur appliquer les résultats du

$$V_z |\varphi_{//}\rangle = v_z |\varphi_{//}\rangle$$

avec v_z étant une constante réelle quelconque et pouvant n'importe quelle valeur positive ou nulle.

$$V_z^2 |\varphi_{//}\rangle = v_z^2 |\varphi_{//}\rangle$$

$$H_{//} |\varphi_{//}\rangle = E_{//} |\varphi_{//}\rangle$$

$$\frac{1}{2} m V_z^2 |\varphi_{//}\rangle = E_{//} |\varphi_{//}\rangle \Rightarrow E_{//} |\varphi_{//}\rangle = \frac{1}{2} m v_z^2 |\varphi_{//}\rangle$$

$$E_{//} = \frac{1}{2} m v_z^2 \quad (25)$$

L'interprétation physique de ce résultat est évident : $H_{//}$ décrit l'énergie cinétique d'une particule libre se déplaçant le long de l'axe Oz .

3.5. Valeurs propres de H_{\perp}

On va supposer par exemple que la particule étudiée a une charge q négative. On fait une étude comparative avec l'oscillateur harmonique dont on utilise les opérateurs \hat{x} et \hat{p} .

On pose :

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_e}} V_y \quad \text{et} \quad \hat{S} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_e}} V_x \quad (26)$$

avec $\omega_e = -q \frac{B}{m}$ étant appelée la pulsation cyclotron.

On a déjà démonté la relation suivante : $[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} \mathbf{B}_z(\vec{R})$

$$H_{\perp} = \frac{1}{2} \hbar \omega_e (\hat{Q}^2 + \hat{S}^2) \quad (27)$$

Alors, H_{\perp} joue le rôle d'un oscillateur harmonique à une dimension, \hat{Q} prend la forme d'un opérateur de position \hat{x} et \hat{S} d'un opérateur d'impulsion \hat{p} . Par exemple, on peut montrer que si $|\varphi_{\perp}\rangle$ est le vecteur propre de H_{\perp} , on écrira :

$$H_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle = E_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle$$

$$\text{On pose alors : } a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{S}) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{S})$$

$$H_{\perp} = aa^+ + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2} \Rightarrow H_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle = N |\varphi_{\perp}\rangle + \frac{1}{2} |\varphi_{\perp}\rangle \Rightarrow H_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle = (n + \frac{1}{2}) |\varphi_{\perp}\rangle$$

On en déduit :

$$E_{\perp} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_e \quad \text{où } n \text{ est entier positif ou nul.}$$

4. Propriétés quantiques des cristaux moléculaires parallèles à l'axe (Oz)

4.1. Etude par résonance paramagnétique

Les cristaux de type AMX_3 peuvent avoir la structure pérovskite cubique ou une structure dérivée tel $CsPbBr_3$ ou une structure avec un caractère fortement unidimensionnel, constituée par des files d'octaèdres partageant une face séparée par des ions A^+ C'est notamment le cas pour $CsCdBr$.

Un autre but recherché est de mettre en pratique au laboratoire l'usage de la sonde Eu^{2+}

et de cerner ses possibilités et sa sensibilité aux abaissements de symétrie. En effet, cette sonde n'a pas encore été utilisée, car elle est complexe. En effet, E_u présente deux isotopes naturelles ^{151}Eu et ^{153}Eu , d'abondance comparable et de spin nucléaire $I = \frac{5}{2}$. Par le biais de l'interaction hyperfine le nombre de raies de résonance est multiplié par rapport à une sonde de même configuration électronique ($4f^7$) telle Gd^{3+} .

4.2. Structure cristalline

D'après L. M. HENLING le groupe d'espace le plus probable pour $CsCdBr_3$ est, le même que ceux $CsMgCl_3$, $CsCdBr_3$ et $CsNiCl_3$ qui ont fait l'objet d'études structurales plus complètes.

Dans $CsCdBr_3$, cependant l'expérience cruciale de R.P.E. dans l'état excité n'a pu être réalisée. De plus la symétrie exacte du défaut d'empilement et l'environnement du pseudo – molécule n'ont pu être déterminés ; la concentration de ces défauts n'est pas connue. On sait simplement qu'elle évolue avec les traitements thermiques.

Pour cette raison, nous avons cherché à percevoir ces défauts par l'utilisation de R.P.E. En effet, des impuretés paramagnétiques situées au bout de chaîne doivent donner en principes des raies de résonance différentes de celles de l'impureté en site normal. Leur identification pourrait permettre de déterminer la symétrie la symétrie ponctuelle du défaut, et sa concentration sous réserve d'une distribution aléatoire de l'impureté dans les sites de Cd^{2+} .

L'utilisation des impuretés trivalentes est exclue : les études antérieures montrent qu'elles s'insèrent dans le réseau de façon particulière.

Nous avons choisi de commencer l'étude par des sondes Eu^{2+} pour laquelle il n'existe pas d'études antérieures.

4.3. Hamiltonien de spin d' Eu^{2+}

L'ion Eu^{2+} est caractérisé par une couche électronique $4f^7$ conduisant à un état fondamental $^8S_{7/2}$. Grâce au formalisme de l'Hamiltonien de spin, on peut interpréter les différentes formes de spectres R.P.E. de l'ion paramagnétique. Ces spectres sont composés des raies de transitions électroniques. Leurs positions dépendent de l'orientation du champ magnétique \vec{H} par rapport aux axes cristallographiques du cristal et de la fréquence des oscillations émises par le Klystron. Pour les contributions les plus importantes, l'expression générale de l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = [g] \beta \vec{H} \vec{S} + \sum_{n,m} b_n^m O_n^m + [A] \vec{I} \vec{S} \quad (28)$$

$$\text{Avec, } [A] = \begin{pmatrix} A_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & A_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & A_{//} \end{pmatrix} \quad (29)$$

4.4. Interaction avec le champ magnétique appliqué (Effet Zeeman)

L'effet Zeeman correspond au premier terme de l'expression de l'Hamiltonien H et représente l'interaction du spin électronique de l'ion paramagnétique avec le champ H,

\vec{S} représente l'opérateur de spin.

La valeur expérimentale de g se situe vers 1,97.

4.5. Interaction avec le champ cristallin (structure fine)

H_c correspond au deuxième terme de l'expression de l'Hamiltonien H et représente l'interaction du spin électronique avec le champ cristallin. Cette interaction est à courte portée et l'on admet actuellement que les ligands jouent le rôle essentiel. La forme générale de l'expression de H_c , selon STEVENS s'écrit :

$$H_c = \sum_{n,m} b_n^m O_n^m \quad (30)$$

O_n^m sont des opérateurs de spin.

b_n^m représentent des paramètres des champs cristallins.

Le champ cristallin doit avoir la même symétrie que celle du site dans lequel est logée l'impureté paramagnétique. Pour la symétrie trigonale, on doit faire intervenir les opérateurs de spin correspondant aux harmoniques sphériques de symétries ternaires selon l'axe trigonal. Donc la symétrie du site doit être traduite dans l'expression de H_c , c'est ainsi qu'il a été montré que l'Hamiltonien de spin pour un ion $s = 7/2$ placé dans un site de symétrie trigonale (dans le repère d'axes cristallographiques) est :

$$H_c = \frac{1}{3} b_2^0 O_2^0 + \frac{1}{60} (b_4^0 O_4^0 + b_4^3 O_4^3) + \frac{1}{1260} (b_6^0 O_6^0 + b_6^3 O_6^3 + b_6^6 O_6^6) \quad (31)$$

En première approximation, les termes b_4^0, b_6^0, b_4^3 et b_6^3 sur les spectres pour être déterminés précisément. La valeur de b_2^0 se détermine approximativement en analysant les spectres enregistrés correspondant à une orientation du champ magnétique directeur

H , plus précisément quand l'axe cristallographique (axe d'ordre 3) du cristal est parallèle à H . Le terme de b_4^3 est responsable d'anticroisement du premier niveaux d'énergie ($\Delta M_s = 3$) et d'anisotropie. Il permet d'autoriser l'apparition des transitions supplémentaires. Les autres anticroisements peuvent s'expliquer par le terme ($\Delta M_s = 6$).

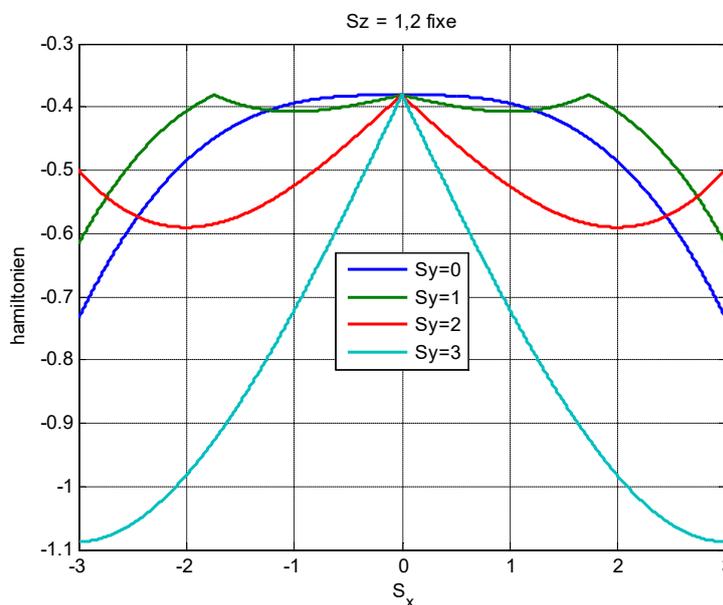


Figure 4: Représentation graphique du Hamiltonien de la structure fine

La figure 5 montre les courbes symétriques obtenues en fonction des composantes du spin S_x, S_y , et S_z dans l'expression de l'Hamiltonien de structure fine, il est essentiel de comprendre la nature de ces courbes et ce qu'elles révèlent sur les interactions du spin dans le système considérés comme S_y paramètre, S_z fixe. Les courbes symétriques en fonction des composantes du spin indiquent souvent une isotropie ou une symétrie particulière dans les interactions du spin.

4.6. Interaction avec la structure hyperfine

Lorsqu'il y a isotropie, l'interaction entre le moment magnétique d'un noyau de spin nucléaire I et le champ électronique d'ion de spin effectif peut se mettre sous la forme $A I \cdot S$. C'est donc le 3^{ième} terme de H dans l'équation (28). La structure hyperfine est due au couplage entre les électrons et les moments électriques et magnétiques des noyaux. Si le spin nucléaire I de l'ion n'est pas nul, celui-ci pourra interagir avec le spin électronique. Dans ce cas, chaque sous-niveau de spin électronique est décomposé en $2I + 1$ sous-niveaux.

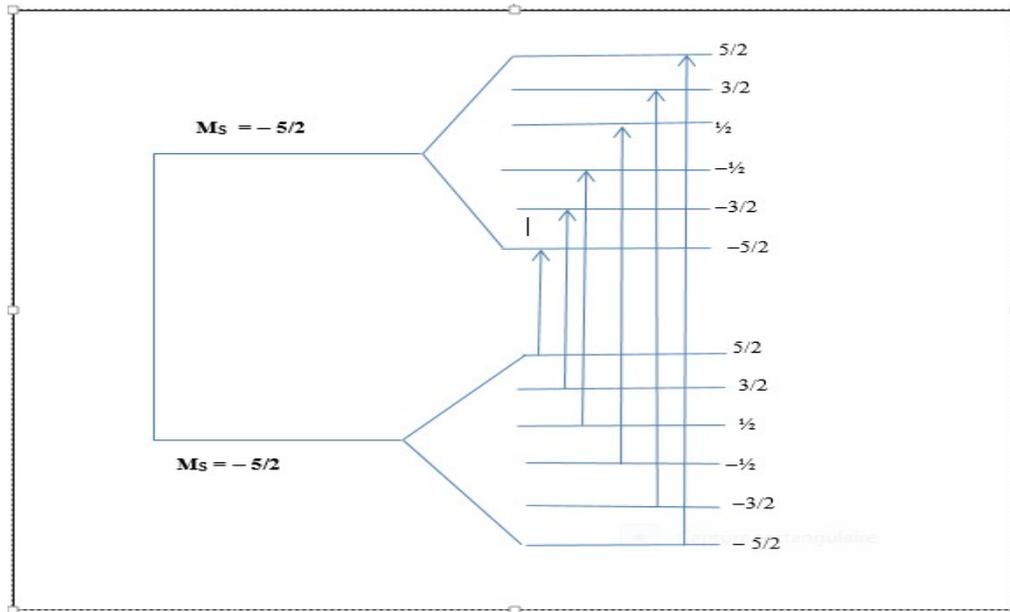


Figure 6: $\text{Eu}^{2+}(s = 7/2, I = 5/2)$

Les transitions autorisées sont donc $\Delta M_s = \pm 1, \Delta M_I = 0$. Les raies produites par les transitions hyperfine dites « interdites », à savoir $\Delta M_I = \pm 1$ sont parfois observées et moins intenses que des raies permises. Elles sont dues aux termes non diagonaux de la structure hyperfine. Les fonctions d'onde de spin électronique et nucléaire sont de la forme $|M_s, M_I\rangle$. Sachant que toutes les raies hyperfines sont équidistantes et leur séparation constitue une mesure approximative du paramètre A correspondant à l'orientation donnée. Pour les spectres de CsCdBr_3 dopé avec Eu^{2+} , ce paramètre a deux valeurs qui sont caractérisées par deux isotopes d'Eu. Les écarts avec les deux valeurs de A sont approximativement dans le rapport des moments magnétiques nucléaires $^{151}\mu / ^{153}\mu = 2,26$. L'intensité relative des raies de deux isotopes est pratiquement identique (abondance naturelle 47, 80% et 52, 20%).

Dans un travail récent (thèse de Chantal ANDRAUD – Paris VI), il a été montré que des bandes de luminescence pourraient être attribuées à des défauts d'alignement des files d'octaèdres. Ces fautes d'alignement auraient pour résultat de créer deux bornes Br^- non partagés par un autre octaèdre constituant ainsi un pseudo-molécule $[\text{Br}_2]^{2-}$. Cependant, une expérience décisive de résonance paramagnétique électronique dans l'état excité triplet n'a pu être réalisée. Par ailleurs, ni la symétrie ponctuelle exacte, ni l'environnement du défaut n'ont pu être précisés.

Ce défaut est important car il conditionne la propagation des excitations le long des chaînes, soit des excitations vibrationnelles, soit des excitations électroniques. En particulier, il peut jouer un rôle pour d'éventuelles réalisations de cristaux laser.

Nous avons donc cherché à avoir si ces défauts pourraient être perçus par une sonde paramagnétique répartie aléatoirement dans le cristal substitué à l'ion Eu^{2+}

La sonde que nous avons choisie est l'ion $\text{Eu}^{2+}(4f^7, s = 7/2)$ car elle est bien adaptée au cristal hôte, tant pour charge que pour le rayon ionique.

IV. CONCLUSION

L'établissement des équations dans les rappels théoriques et classiques a permis d'explicitier l'Hamiltonien de la particule chargée plongée dans un champ magnétique parallèle à l'axe oz. Cet Hamiltonien met en valeur l'utilisation de la mécanique quantique en considérant les commutateurs des opérateurs impliqués, conformément aux travaux de Texier et aux principes de la mécanique quantique.

Pour l'Hamiltonien du cristal moléculaire unidimensionnel de CsCdBr₃, grâce à son expression dérivée de la formule générale, nous avons pu déterminer l'Hamiltonien de spin (Eu²⁺) dans le cristal CsCdEu²⁺. Cette étude révèle que l'interaction avec la structure hyperfine, comme discuté dans les recherches sur les systèmes de spin, confère une spécificité notable à cet article.

Les courbes de l'Hamiltonien de la particule et de celui des cristaux, tracées à l'aide du logiciel Matlab, illustrent clairement les dynamiques quantiques et les interactions hyperfines. Ces résultats confirment l'importance de l'approche théorique et computationnelle dans l'étude des systèmes quantiques complexes.

REFERENCES

- [1] S. Martin, P. Dubois. Effets des Champs Magnétiques sur les Particules Chargées dans les Réseaux Cristallins. Revue Française de Physique, 2019.
- [2] Takahashi, S., & A. Saito (2012). Bases de la mécanique quantique et de la computation quantique avec des références aux Hamiltoniens en présence de champs magnétiques.
- [3] C. Nguyen, P. Garcia. Étude Théorique des Hamiltoniens de Particules Chargées en Présence de Champs Magnétiques Intenses. Annales de Physique, 2020.
- [4] Lefebvre, A. (2008). Particules chargées et champs magnétiques : une approche Hamiltonienne. Annales de Physique, 33(2), 89-102.
- [5] E. Lee, F. Zhang. Propriétés Magnétiques des Composés Eu²⁺ dans les Réseaux Cristallins AMX₃. Journal Européen de Physique, 2022.
- [6] Abragam, A., & Bleaney, B. (2012). Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions. Oxford University Press.
- [7] Hahn, E. L. (2007). Nuclear Magnetic Resonance: A Century of Progress. Oxford University Press.
- [8] Durand, M. Caractérisation des propriétés magnétiques des cristaux de type AMX₃. Revue de Physique 2017.
- [9] H. T. W. Wong, & R. (2017). Interactions hyperfines dans les solides et les molécules avec des applications aux ions de terres rares.
- [10] L. W. J. C. Gardner, & J. (2014). Techniques de résonance magnétique en physique avec des références aux Hamiltoniens de particules dans des champs magnétiques.
- [11] L. J. P. K. Schmidt, & M. mécanique quantique des systèmes de spin, incluant les Hamiltoniens pour les ions comme Eu²⁺ dans des champs magnétiques.
- [12] Giraud M et al. Etude des niveaux d'énergie dans CsCdEu²⁺. Revue de Physique 2017 B 2019.
- [13] H. F. G. M. Hartmann, & P. (2007). Magnetic Resonance Spectroscopy: Theory and Applications.
- [14] Bleaney, B., & Abragam, A. (2010). Résonance Paramagnétique Électronique des Ions de Transition. Éditions Hermann.
- [15] A. Dupuis, J. Lefebvre. Étude des Propriétés Magnétiques des Composés Eu²⁺ dans les Matériaux AMX₃. Journal de Physique et Chimie des Matériaux, 2016.
- [16] M. Garcia, E. Lee. Analyse des Interactions Magnétiques dans les Composés de Type AMX₃. Journal Européen de Physique Appliquée, 2023.
- [17] L. Nguyen, C. Petit. Modélisation des Interactions de Spin dans les Systèmes Eu²⁺. Annales de Physique Théorique, 2021.



- [18] Dupont, J., & Martin, P. (2010). Étude de l'Hamiltonien des particules chargées dans un champ magnétique. *Revue de Physique Théorique*, 45(3), 123-135.
- [19] M. Dupont, L. Martin. Effets du Champ Magnétique sur les Particules Chargées dans les Cristaux de Type AMX3. *Revue de Physique Appliquée*, 2018.
- [20] R. M. K. Anderson, & A. (2013). Introduction à la mécanique quantique avec des applications aux Hamiltoniens dans des champs magnétiques.
- [21] Durand, F., & Petit, C. (2015). Modélisation Hamiltonienne des particules chargées dans les cristaux. *Journal de Physique et Chimie des Solides*, 76(4), 567-578.