

Spin 1/2 dans un champ magnétique : Système à deux niveaux

Amaury Maros

7 avril 2025

Ce document présente le compte rendu des travaux pratiques réalisés dans le cadre du TP de Mécanique Quantique de l'UE *Gestion informatique et Python* du M1 Physique à distance de l'Université Aix-Marseille. Il est consacré au spin 1/2 dans un champ magnétique. Une première partie comprend l'étude analytique du problème où les questions de l'énoncé sont traitées dans l'ordre. Une seconde partie présente les résultats obtenus numériquement ainsi que le code utilisé.

Table des matières

1	Partie analytique	1
1.1	Question 1	1
1.2	Question 2	2
1.3	Question 3	4
1.4	Question 4	4
1.5	Question 5	5
2	Partie numérique	6
2.1	Résultats	6
2.2	Code Python	7

1 Partie analytique

1.1 Question 1

Le Hamiltonien du système est donné par $H = H_0 + W$. D'après l'énoncé :

$$H = \omega_0 S_z + \omega_1 S_x \quad (1)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_1 \\ \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Ainsi, le Hamiltonien final est :

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

1.2 Question 2

Énergies propres

On cherche les énergies propres de H . On résout l'équation :

$$\det(H - E \cdot \text{Id}) = 0$$

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} - E & \frac{\hbar\omega_1}{2} \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} & -\frac{\hbar\omega_0}{2} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (5)$$

Développement du déterminant :

$$\left(\frac{-\hbar^2\omega_0^2}{4} + E^2 \right) - \frac{\hbar^2\omega_1^2}{4} = 0 \quad (6)$$

$$E^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\omega_0^2 + \omega_1^2) \quad (7)$$

Les énergies propres sont donc :

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$$

États propres

Soit $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ un état propre de H dans la base des états propres $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. On cherche à résoudre l'équation aux valeurs propres $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

Pour E_+

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (8)$$

On obtient le système suivant :

$$\begin{cases} \omega_0 a + \omega_1 b = a \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \\ \omega_1 a - \omega_0 b = b \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \end{cases} \quad (9)$$

On peut donc exprimer b en fonction de a :

$$b = a \cdot \frac{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} - \omega_0}{\omega_1} \quad (10)$$

$$= a \cdot \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \left(\frac{1 - \frac{\omega_0}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}}}{\omega_1} \right) \quad (11)$$

$$= a \cdot \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \quad (12)$$

$$= a \cdot \tan(\theta/2) \quad (13)$$

$$= a \cdot \frac{\sin(\theta/2)}{\cos(\theta/2)} \quad (14)$$

En prenant $a = \cos(\theta/2)$, on a $b = \sin(\theta/2)$. Le ket $|\psi_+\rangle$ vaut alors :

$$|\psi_+\rangle = \cos(\theta/2) |+\rangle + \sin(\theta/2) |-\rangle$$

On vérifie la condition de normalisation :

$$\langle \psi_+ | \psi_+ \rangle = \cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2) = 1$$

Pour E_-

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (15)$$

On obtient le système suivant :

$$\begin{cases} \omega_0 a + \omega_1 b = -a \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \\ \omega_1 a - \omega_0 b = -b \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \end{cases} \quad (16)$$

On peut exprimer b en fonction de a :

$$b = a \cdot \frac{-\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} - \omega_0}{\omega_1} \quad (17)$$

$$= -a \cdot \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \quad (18)$$

$$= -a \cdot \cot(\theta/2) \quad (19)$$

$$= -a \cdot \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2)} \quad (20)$$

En prenant $a = -\sin(\theta/2)$, on a $b = \cos(\theta/2)$. Le ket $|\psi_-\rangle$ vaut alors :

$$|\psi_-\rangle = -\sin(\theta/2) |+\rangle + \cos(\theta/2) |-\rangle$$

On vérifie la condition de normalisation :

$$\langle \psi_- | \psi_- \rangle = \sin^2(\theta/2) + \cos^2(\theta/2) = 1$$

Bilan

Les états propres du Hamiltonien sont donc :

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = \cos(\theta/2) |+\rangle + \sin(\theta/2) |-\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin(\theta/2) |+\rangle + \cos(\theta/2) |-\rangle \end{cases} \quad (21)$$

1.3 Question 3

L'état initial est donné à $t = 0$ par $|\psi_0\rangle = \lambda |\psi_+\rangle + \mu |\psi_-\rangle$. En introduisant l'opérateur d'évolution temporelle, les états $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ évoluent comme suit :

$$|\psi_+(t)\rangle = e^{-i\frac{E_+t}{\hbar}} |\psi_+\rangle \quad (22)$$

$$|\psi_-(t)\rangle = e^{-i\frac{E_-t}{\hbar}} |\psi_-\rangle \quad (23)$$

L'état $|\psi(t)\rangle$ est donc une superposition de ces 2 états :

$$|\psi(t)\rangle = \lambda e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle + \mu e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \quad (24)$$

1.4 Question 4

Expression de $|+\rangle$ dans $\{|\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle\}$

On peut réécrire l'équation 21 sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{bmatrix} \quad (25)$$

Soit $M = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$.

Le déterminant de M est :

$$\det M = \cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2) = 1$$

L'inverse de M est donné par :

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} M^{-1} \begin{bmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{bmatrix} &= M^{-1} M \begin{bmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Ainsi, on obtient l'expression suivante pour $|+\rangle$ et $|-\rangle$:

$$\begin{cases} |+\rangle = \cos(\theta/2) |\psi_+\rangle - \sin(\theta/2) |\psi_-\rangle \\ |-\rangle = \sin(\theta/2) |\psi_+\rangle + \cos(\theta/2) |\psi_-\rangle \end{cases} \quad (26)$$

1.5 Question 5

On suppose que l'état initial est $|\psi_0\rangle = |+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle$.

L'évolution temporelle est donnée d'après 24 pour $\lambda = \cos(\theta/2)$ et $\mu = \sin(\theta/2)$ par :

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \quad (27)$$

On veut calculer la probabilité \mathcal{P}_{+-} de retrouver l'état $|-\rangle$ à l'instant t en étant initialement dans l'état $|+\rangle$:

$$\mathcal{P}_{+-}(t) = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 \quad (28)$$

On utilise l'expression :

$$|-\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \quad (29)$$

Alors, on peut calculer le produit scalaire $\langle -|\psi(t)\rangle$:

$$\langle -|\psi(t)\rangle = \left(\sin \frac{\theta}{2} \langle \psi_+| + \cos \frac{\theta}{2} \langle \psi_-| \right) \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \right) \quad (30)$$

En développant ce produit scalaire, comme les états $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont orthogonaux, nous obtenons :

$$\langle -|\psi(t)\rangle = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} - \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} \quad (31)$$

$$= \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} (e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}) \quad (32)$$

En utilisant $E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \Omega$ avec $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$, on a :

$$\langle -|\psi(t)\rangle = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} (e^{-i\frac{\Omega t}{2}} - e^{i\frac{\Omega t}{2}}) \quad (33)$$

$$= -i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot 2 \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \quad (34)$$

Ainsi, la probabilité $\mathcal{P}_{+-}(t)$ est donnée par :

$$\mathcal{P}_{+-}(t) = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 \quad (35)$$

$$= \left| -i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot 2 \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right|^2 \quad (36)$$

$$= 4 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \quad (37)$$

$$= \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \quad (38)$$

On a donc :

$$\boxed{\mathcal{P}_{+-}(t) = \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}}{2} t \right)} \quad (39)$$

2 Partie numérique

2.1 Résultats

Dans cette partie, nous proposons une solution numérique au problème étudié. Le code utilisé est disponible en annexe. La figure suivante présente les résultats obtenus et permet de comparer les solutions analytiques et numériques :

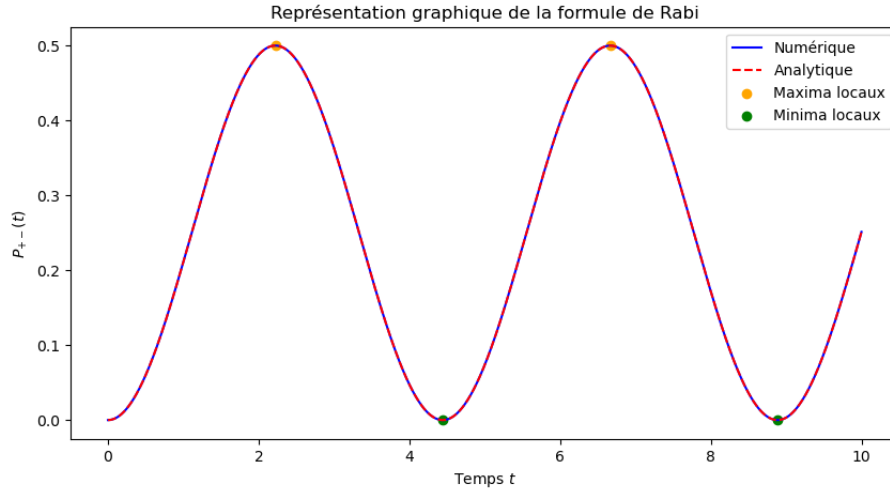


FIGURE 1 – Représentation graphique des résultats analytiques et numériques

Les résultats numériques concordent bien avec les résultats analytiques. On observe que l'évolution de la probabilité suit une loi sinusoïdale. En identifiant les extrema locaux, il est possible de déterminer la fréquence d'oscillation du système. Dans notre simulation, cette fréquence est d'environ 0.225 Hz. Naturellement, cette valeur dépend de la configuration initiale choisie et des valeurs attribuées aux paramètres ω_0 et ω_1 , toutes deux initialisées à 1 dans notre modélisation.

Sur le plan analytique, la fréquence d'oscillation est donnée par l'équation 39. L'oscillation est gouvernée par le terme $\sin^2 \left(\frac{\Omega}{2} t \right)$, où $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$. Étant donné que la fonction $\sin^2(t)$ est π -périodique, la période de $\sin^2 \left(\frac{\Omega}{2} t \right)$ est donc :

$$T = \frac{2\pi}{\Omega}$$

La fréquence correspondante s'écrit alors :

$$\boxed{f = \frac{\Omega}{2\pi}} \quad (40)$$

En utilisant cette relation avec les mêmes paramètres que dans la simulation numérique, nous retrouvons une fréquence théorique d'environ 0.225 Hz, en accord avec les résultats obtenus numériquement.

La figure 2 suivante présente les résultats obtenus pour différents couples de valeurs pour ω_0 et ω_1 .

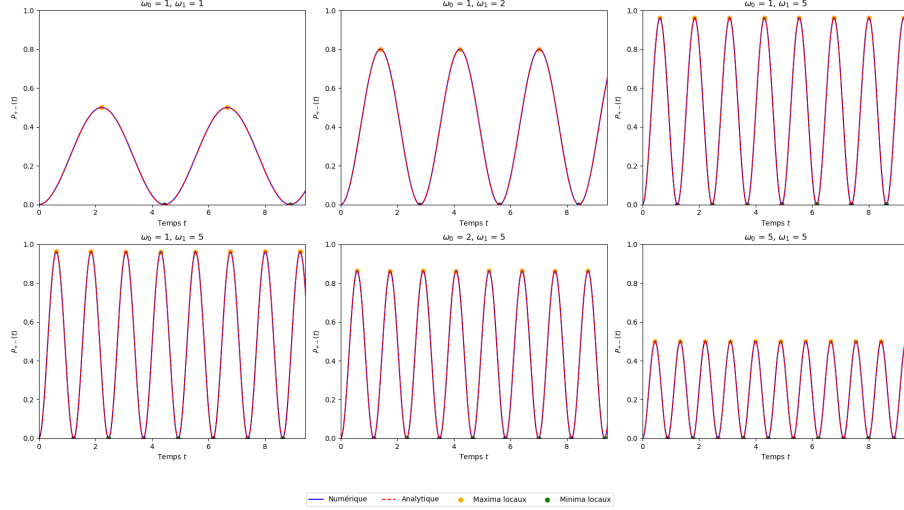


FIGURE 2 – Représentation graphique des résultats analytiques et numériques pour différents couples (ω_0, ω_1)

On observe que l'amplitude des oscillations de la probabilité de transition dépend de l'écart entre ω_0 et ω_1 . Plus cet écart est important, plus l'amplitude des oscillations est élevée. Cela se vérifie aussi bien lorsque ω_0 est maintenu constant (ligne supérieure de la figure 2) que lorsque ω_1 est fixé (ligne inférieure). Physiquement, cela reflète le fait qu'un système fortement couplé (grande différence entre les deux composantes) oscille avec une plus grande efficacité entre ses deux états, traduisant une dynamique de transition plus marquée. Au delà de l'amplitude, on observe également une augmentation de la fréquence d'oscillation lorsque ω_1 augmente.

Ainsi, en considérant un système où l'on peut contrôler les paramètres ω_0 et ω_1 , il est possible de contrôler les changements d'état des particules, passant d'un état de spin à un autre à une fréquence et une probabilité connues. Plusieurs applications utilisent ce procédé, comme la résonance magnétique nucléaire (RMN) ou le contrôle des qubits dans les ordinateurs quantiques.

2.2 Code Python

Annexe_Code_Python

April 7, 2025

```
[1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.constants as constant

[2]: # Définition des paramètres
hbar = constant.hbar
omega_0 = 1
omega_1 = 1
Omega = np.sqrt(omega_0**2 + omega_1**2)

# Hamiltonien
H = (hbar / 2) * np.array([[omega_0, omega_1], [omega_1, -omega_0]])

# Diagonalisation de l'Hamiltonien
E, V = np.linalg.eigh(H)

# Définition de l'état initial
psi_plus = np.array([1, 0])
psi_minus = np.array([0, 1])

# Changement de base
coeffs = np.dot(V.T.conj(), psi_plus)

# Définition de la fonction d'évolution temporelle
def evolution(t):
    return coeffs[0] * np.exp(-1j * E[0] * t / hbar) * V[:, 0] + coeffs[1] * np.
    ↪exp(-1j * E[1] * t / hbar) * V[:, 1]

# Calcul de la probabilité de transition  $P_{+-}(t)$ 
def proba(t):
    psi_t = evolution(t)
    return np.abs(np.dot(psi_minus.conj(), psi_t))**2

# Génération des données pour le tracé
t_vals = np.linspace(0, 10, 1000)
P_vals = np.array([proba(t) for t in t_vals])
```



```

# Formule de Rabi analytique
P_analytic = (omega_1/Omega)**2 * np.sin(Omega * t_vals / 2)**2

# Calcul de la dérivée numérique
dP_dt = np.gradient(P_vals, t_vals)

# Trouver les indices où la dérivée change de signe
maxima_indices = np.where((dP_dt[:-1] > 0) & (dP_dt[1:] < 0))[0]
minima_indices = np.where((dP_dt[:-1] < 0) & (dP_dt[1:] > 0))[0]

# Fréquence d'oscillation graphique
T = t_vals[maxima_indices[1]] - t_vals[maxima_indices[0]]
omega_rabi = 1/T

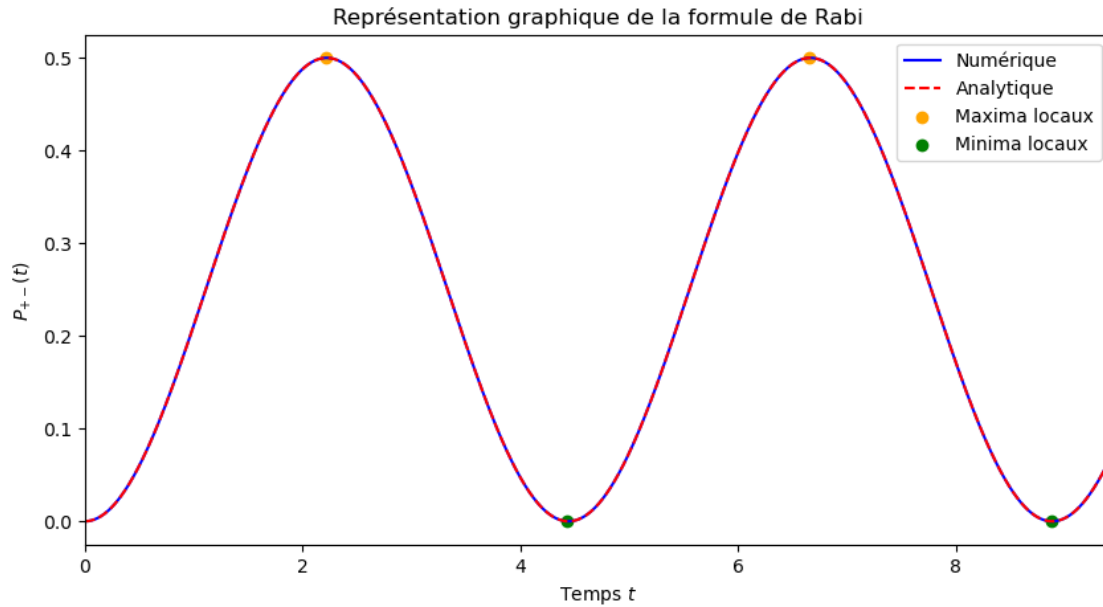
print(f"Fréquence d'oscillation analytique: {Omega / (2*np.pi)} Hz")
print(f"Fréquence d'oscillation graphique: {omega_rabi} Hz")

# Tracé
plt.figure(figsize=(10, 5))
# Tracés de P analytique et P numerique
plt.plot(t_vals, P_vals, color = 'blue', label=r"Numérique", linestyle="-")
plt.plot(t_vals, P_analytic, color = 'red', label=r"Analytique", linestyle="--")
# Tracés des min et max locaux
plt.scatter(t_vals[maxima_indices], P_vals[maxima_indices], color='orange',
            ↪label='Maxima locaux')
plt.scatter(t_vals[minima_indices], P_vals[minima_indices], color='green',
            ↪label='Minima locaux')
# Frequence de Rabi
# plt.text(x=7.5, y=0.35, s=f"Fréquence de Rabi = {omega_rabi:.3f} Hz")
plt.xlabel(r"Temps $t$")
plt.ylabel(r"$P_{+-}(t)$")
plt.title(r"Représentation graphique de la formule de Rabi")
plt.legend()
plt.xlim((0, 3*np.pi))
plt.grid(False)
plt.show()

```

Fréquence d'oscillation analytique: 0.22507907903927654 Hz

Fréquence d'oscillation graphique: 0.22499999999999998 Hz



```
[3]: # Définition des couples (omega_0, omega_1)
# couples = [(1, 1), (1, 2), (1, 5), (2, 2), (2, 5), (5, 5)]
couples = [(1, 1), (1, 2), (1, 5), (1, 5), (2, 5), (5, 5)]

fig, axs = plt.subplots(2, 3, figsize=(18, 10))
axs = axs.flatten()

hbar = constant.hbar
for ax, (omega_0, omega_1) in zip(axs, couples):
    Omega = np.sqrt(omega_0**2 + omega_1**2)
    H = (hbar / 2) * np.array([[omega_0, omega_1], [omega_1, -omega_0]])
    E, V = np.linalg.eigh(H)

    psi_plus = np.array([1, 0])
    psi_minus = np.array([0, 1])
    coeffs = np.dot(V.T.conj(), psi_plus)

    def evolution(t):
        return coeffs[0] * np.exp(-1j * E[0] * t / hbar) * V[:, 0] + coeffs[1] *
        ↪ np.exp(-1j * E[1] * t / hbar) * V[:, 1]

    def proba(t):
        psi_t = evolution(t)
        return np.abs(np.dot(psi_minus.conj(), psi_t))**2

    t_vals = np.linspace(0, 10, 1000)
```

```

P_vals = np.array([proba(t) for t in t_vals])
P_analytic = (omega_1/Omega)**2 * np.sin(Omega * t_vals / 2)**2

dP_dt = np.gradient(P_vals, t_vals)
maxima_indices = np.where((dP_dt[:-1] > 0) & (dP_dt[1:] < 0))[0]
minima_indices = np.where((dP_dt[:-1] < 0) & (dP_dt[1:] > 0))[0]

T = t_vals[maxima_indices[1]] - t_vals[maxima_indices[0]]
omega_rabi = 1 / T

ax.plot(t_vals, P_vals, color='blue', label="Numérique", linestyle="-")
ax.plot(t_vals, P_analytic, color='red', label="Analytique", linestyle="--")
ax.scatter(t_vals[maxima_indices], P_vals[maxima_indices], color='orange',
↪label='Maxima locaux')
ax.scatter(t_vals[minima_indices], P_vals[minima_indices], color='green',
↪label='Minima locaux')

ax.set_xlim((0, 3*np.pi))
ax.set_ylim((0, 1))
ax.set_xlabel(r"Temps $t$")
ax.set_ylabel(r"$P_{+-}(t)$")
ax.set_title(fr"$\omega_0$ = {omega_0}, $\omega_1$ = {omega_1}")
ax.grid(False)

# Légende commune
handles, labels = axs[0].get_legend_handles_labels()
fig.legend(handles, labels, loc='lower center', ncol=4, bbox_to_anchor=(0.5, -0.
↪02))

plt.tight_layout()
plt.subplots_adjust(bottom=0.12)
plt.show()

```

