Mécanique quantique

TD 3: Systèmes à deux niveaux – Résonance magnétique nucléaire

1 Systèmes quantiques à deux états

La représentation sous forme de matrices des moments cinétiques est extrêmement pratique, car elle se généralise à tout système avec un nombre fini de degrés de liberté. [1]

On considère ici deux atomes isolés (H et Cl pour fixer les idées). On suppose qu'une seule orbitale ϕ_i d'énergie ε_i est accessible pour chacun des atomes. Lorsqu'on rapproche les deux atomes, un couplage entre les deux états s'établit. Dans la base $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$, le hamiltonien du système possède alors des termes croisés non nuls $\langle \phi_2 |\hat{H}| \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 |\hat{H}| \phi_2 \rangle^\star = W$.

1. Écrire le hamiltonien total du problème sous forme de matrice ; calculer ses énergies propres E_+ et E_-. Pourquoi parle-t-on de *levée de dégénerescence* ?

On pose $\Delta = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ (le *désaccord*) et $\overline{E} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$. De façon très similaire au cas du spin, les états propres d'un tel système peuvent s'écrire sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi_+\rangle = +\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\varphi}{2}}\, |\phi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi}{2}}\, |\phi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\varphi}{2}}\, |\phi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi}{2}}\, |\phi_2\rangle \end{array} \right. \qquad \text{avec } \sin^2\theta = \frac{4|W|^2}{4|W|^2 + \Delta^2} \text{ et } W = |W| e^{i\varphi}. \tag{1}$$

2. Réécrire les énergies propres en fonction de $\overline{E}$ et Δ, et les tracer en fonction de Δ en maintenant $\overline{E}$ constant, pour plusieurs valeurs de $|W|$.

3. On prépare le système dans l'état $|\phi_1\rangle$ à $t < 0$, puis on branche le couplage entre les atomes W. Exprimer l'état $|\psi(t)\rangle$ du système en fonction du temps.

4. Calculer la probabilité qu'il soit après un temps t dans l'état $|\phi_2\rangle$, et la tracer en fonction du temps. On choisira différentes valeurs de Δ. Dans quelle circonstance parle-t-on de couplage fort ?

2 Résonance magnétique nucléaire

L'objectif de cet exercice est de décrire le mouvement d'un moment magnétique dans un champ magnétique tournant.

On considère un champ magnétique $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + \vec{B}_1(t)$ où $\vec{B}_1(t)$ est un champ magnétique tournant à la pulsation Ω dans le plan xOy.

Approche classique

Afin de résoudre l'équation d'évolution du moment $\vec{\mu}(t)$, on se place dans un référentiel $\mathscr{R}'$ tournant à Ω selon l'axe Oz. Soit $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y, \vec{e}_Z)$ une base orthonormée du référentiel $\mathscr{R}'$ superposée à la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ de $\mathscr{R}$ à $t = 0$. On pose $\omega_1 = -\gamma B_1$. On rappelle que

$$\left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathscr{R}'} = \left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathscr{R}} - \omega \vec{e}_Z \wedge \vec{\mu}(t). \tag{2}$$

5. Déduire de (2) l'équation du mouvement de $\vec{\mu}(t)$ dans le référentiel tournant. Montrer que cela revient à étudier le mouvement d'un moment dans un champ magnétique effectif *statique* $\vec{B}_{\text{eff}}$ dont on donnera l'expression en fonction de γ, $\Delta\omega = \Omega - \omega_0$ et ω_1.

6. Commenter le mouvement du moment dans le référentiel $\mathscr{R}'$ en fonction des valeurs de $\Delta\omega$ et ω_1. Tracer son évolution temporelle.

1. En particulier, l'analogie avec le spin peut être poussée très loin car tout système à deux degrés de liberté peut s'écrire sous la forme d'un spin fictif.

Approche quantique

7. Rappeler l'expression des opérateurs de moment cinétique propre S_x, S_y et S_z dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ des états propres de S_z. Montrer que le hamiltonien peut s'écrire

$$H = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

On s'intéresse à la dynamique d'un état $|\psi\rangle$ qu'on décompose sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ en :

$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)\,|+\rangle + a_-(t)\,|-\rangle \tag{4}$$

8. Soit l'état quantique $|\phi(t)\rangle = b_+(t)\,|+\rangle + b_-(t)\,|-\rangle$ tels que $b_\pm(t) = e^{\pm i\frac{\omega t}{2}} a_\pm(t)$. Écrire les équations vérifiées par les coefficients $b_\pm(t)$. Quel est l'équivalent classique de ce changement de variables ?

9. En déduire que cela revient à résoudre l'équation matricielle

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\,|\phi\rangle}{\mathrm{d}t} = \tilde{H}\,|\phi\rangle \tag{5}$$

avec une matrice $\tilde{H}$ 2×2 indépendante du temps que l'on exprimera.

10. En utilisant les résultats du premier exercice, calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\tilde{H}$.

11. On suppose que $|\psi\rangle(t=0) = |+\rangle$. Montrer que $\mathscr{P}_{+-} = |\langle -|\phi\rangle|^2(t) = |\langle -|\psi\rangle|^2(t)$. En déduire l'expression de $\mathscr{P}_{+-}(t)$ en fonction de ω_1 et $\Delta\omega$.

12. Tracer et discuter ce résultat pour $\Delta\omega = 0$ et $2\sqrt{2}|W|$. Justifier la dénomination de « résonance » magnétique.

1

TD3 MQ

TD 3 : Système à deux niveaux - RMN

1 Système quantiques à deux états

1) +2) 2 atomes H et Cl classique avec une énergie accessible $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$.

base : $\{ |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \}$

$$\Rightarrow H = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_1 & W \\ \overline{W} & \mathcal{E}_2 \end{pmatrix}$$

On veut calculer les énergies propres E_+ et E_-

On va donc résoudre :

$$\det\left(H - \lambda\, Id\right) = 0$$

$$\Rightarrow \left(\mathcal{E}_1 - \lambda\right)\left(\mathcal{E}_2 - \lambda\right) - |W|^2 = 0$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_1\mathcal{E}_2 - |W|^2 - \lambda\left(\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2\right) + \lambda^2 = 0$$

$$\underline{\Delta}_{dis} = \mathcal{E}_1^2 + \mathcal{E}_2^2 + 2\mathcal{E}_1\mathcal{E}_2 - 4\left(\mathcal{E}_1\mathcal{E}_2 - |W|\right)^2$$

$$= \mathcal{E}_1^2 - 2\mathcal{E}_1\mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_2^2 - 4|W|^2$$

$$= \underbrace{\left(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2\right)}_{\Delta}{}^2 + 4|W|^2$$

donc $\lambda_\pm = \dfrac{\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 \pm \sqrt{\Delta^2 + 4|W|^2}}{2} \Rightarrow \lambda_\pm\ \overline{E} \pm \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + |W|^2}$

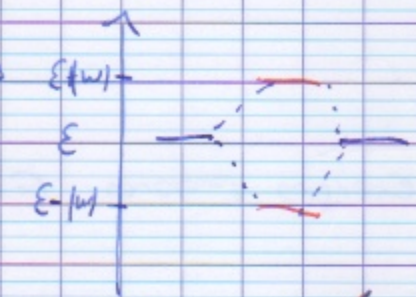
d'où $E_+ = \bar{E} + \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + |W|^2}$

$E_- = \bar{E} - \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + |W|^2}$

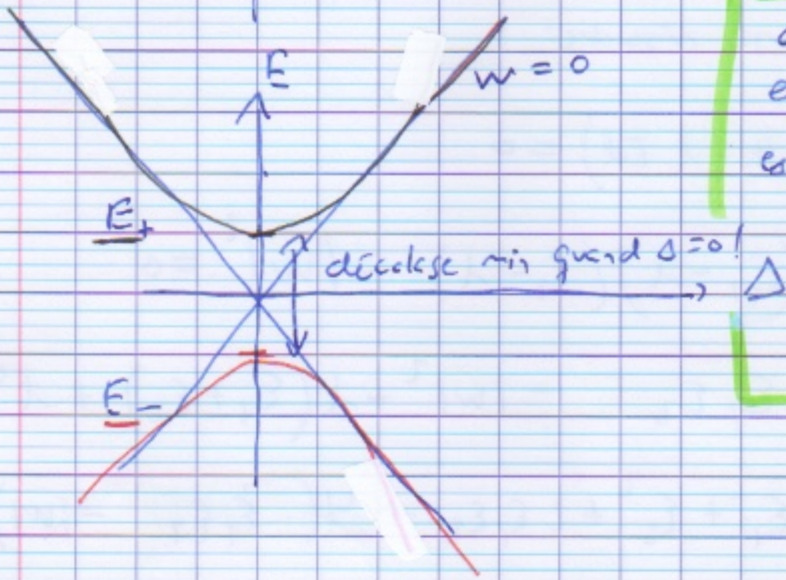
On parle de levée de dégénérescence si $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$

alors $E_\pm = \varepsilon \pm |W|$ $(\Delta = 0$ et $\bar{E} = \varepsilon)$

alors



!



on voit que le décalage entre — et — est minimal quand $\Delta = 0$
$\Rightarrow E_+ = E_-$
$\Rightarrow$

$$E_+(\Delta=0) - E_-(\Delta=0) = 2|W|$$

Les effets seront d'autant plus visibles que $\varepsilon_+ = \varepsilon_-$
C'est vrai aussi pour des oscillateurs couplés où l'effet du couplage sera d'autant ⊕ visible que les masses sont proches.

2

TD 3 MQ

3) on prépare à $t=0$ $|\psi(0)\rangle = |\phi_1\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = a(t)\,|\psi_+\rangle + b(t)\,|\psi_-\rangle$$

Shrödinger :

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt}$$

$$\Rightarrow i\hbar \left(a'(t)\,|\psi_+\rangle + b'(t)\,|\psi_-\rangle\right) = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t)\,|\psi_+\rangle \\ b(t)\,|\psi_-\rangle \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow a(t) = a(0)\, e^{-i\frac{E_+ t}{\hbar}}$$

$$b(t) = b(0)\, e^{-i\frac{E_- t}{\hbar}}$$

méthode : 1) Trouver valeurs propres
2) trouver vecteurs propres $|1\rangle$ et $|2\rangle$
3) Écrire $|\psi(t=0)\rangle$ dans la base $\{|1\rangle$ et $|2\rangle\}$
4) Écrire $|\psi(t)\rangle$ en rajoutant les $e^{-i\omega t}$

sachant que $|\psi(t)\rangle = a(0)\, e^{-i\frac{E_+ t}{\hbar}} |\psi_+\rangle + b(0)\, e^{+i\frac{E_- t}{\hbar}} |\psi_-\rangle$

à $t=0$ $|\psi(t)\rangle = |\phi_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\varphi}{2}}\,|\psi_+\rangle - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}}\,|\psi_-\rangle$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\left(-\frac{\varphi}{2} + \frac{E_+ t}{\hbar}\right)}\,|\psi_+\rangle - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\left(\frac{+\varphi}{2} - \frac{E_- t}{\hbar}\right)}$$

correct !

pour trouver $a(0)$ et $b(0)$ on fait le produit scalaire $\langle \psi_+ | \phi_1 \rangle$ pour $a(0)$ et :

$\langle \psi_- | \phi_1 \rangle$ pour $b(0)$

Car nous sommes dans une base orthonormée !

⚠ ordre du produit scalaire !

4)