

Évolution temporelle d'un système quantique à 2 niveaux

15 Janvier 2021

Niveau : L3

Prérequis : Formalisme de Dirac, calcul de vecteur d'état et de vecteurs propres, équation de Schrödinger

Introduction

www.youtube.com/watch?v=zaEzZaz9wEU&ab_channel=ManuelMoreiraBaptista

Je suis partie d'une vidéo montrant l'inversion de la molécule d'ammoniac. Ne pouvant expliquer cette inversion par la physique classique on a besoin d'utiliser des outils quantiques. Ceux-ci seront abordés au cours de cette leçon notamment de l'évolution temporelle de de vecteur d'état d'un système à deux niveaux.

1 Évolution temporelle d'un vecteur d'état

Avant de parler de la molécule d'Ammoniac on va commencer par introduire les outils nécessaires pour étudier l'évolution temporelle d'un vecteur d'état.

1.1 États stationnaires

Le système le plus simple que l'on puisse étudier est un système à 2 niveaux.

Le Hamiltonien du système est : $\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$ dans la base orthonormée des vecteurs propres associés aux énergies propres E_1, E_2 : $\{|1\rangle, |2\rangle\}$.

Le Hamiltonien est diagonal dans cette base.

On veut étudier l'évolution temporelle d'un vecteur d'état. De manière générale, on a peut l'écrire comme :

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t) |1\rangle + a_2(t) |2\rangle$$

On prépare le système à $t=0$ dans l'état $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$.

On utilise l'équation de Schrödinger qui est l'outil phare de cette leçon.

Si on projette l'équation de Schrödinger dans la base des états propres et que l'on résout les équations différentielles du premier ordre en prenant en compte les CI, on arrive à la conclusion

que notre vecteur d'état pour tout t ne diffère pas du vecteur d'état à l'état initial qu'à un facteur de phase près.

Les états propres du Hamiltonien indépendant du temps sont des états stationnaires.

1.2 Couplage

On rajoute un couplage. J'ai choisi d'en prendre un antidiagonale à coefficient réel (W) pour simplifier les calculs. On peut l'écrire :

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W & 0 \end{pmatrix}$$

Les nouveaux états propres sont :

$$\begin{cases} |+\rangle = \cos(\theta/2) |1\rangle + \sin(\theta/2) |2\rangle \\ |-\rangle = -\sin(\theta/2) |1\rangle + \cos(\theta/2) |2\rangle \end{cases}$$

avec $\tan \theta = \frac{2W}{E_1 - E_2}$

On cherche toujours l'évolution temporelle d'un vecteur d'état général à l'aide de l'équation de Schrödinger. On trouve :

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

On calcule alors la probabilité de trouver le système dans l'état $|2\rangle$ à t alors qu'on part d'un système préparé dans l'état $|1\rangle$ à l'état initial :

$$\mathcal{P}_2(t) = \frac{4W^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2} \sin^2 \frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar}$$

C'est la formule de Rabi.

La probabilité de Rabi oscille au cours du temps à la pulsation de Bohr du système.

- Couplage fort : la probabilité maximale tend vers 1.
- Couplage fort : l'état de départ est très proche de l'état stationnaire du système. Le système évoluera donc que très peu au cours du temps.

Attention ce graphique est maladroit. J'avais divisé par $4W$ le pré facteur du sinus dans la probabilité. J'ai donc tracé pour plusieurs rapport qui sont inversement proportionnel au couplage, ainsi le rapport le plus faible correspond au couplage fort et le rapport le plus important correspond au couplage faible. C'est un peu malheureux comme tournure.

Transition : On revient donc à notre exemple de la molécule d'ammoniac, maintenant que nous avons tous les outils pour l'étudier.

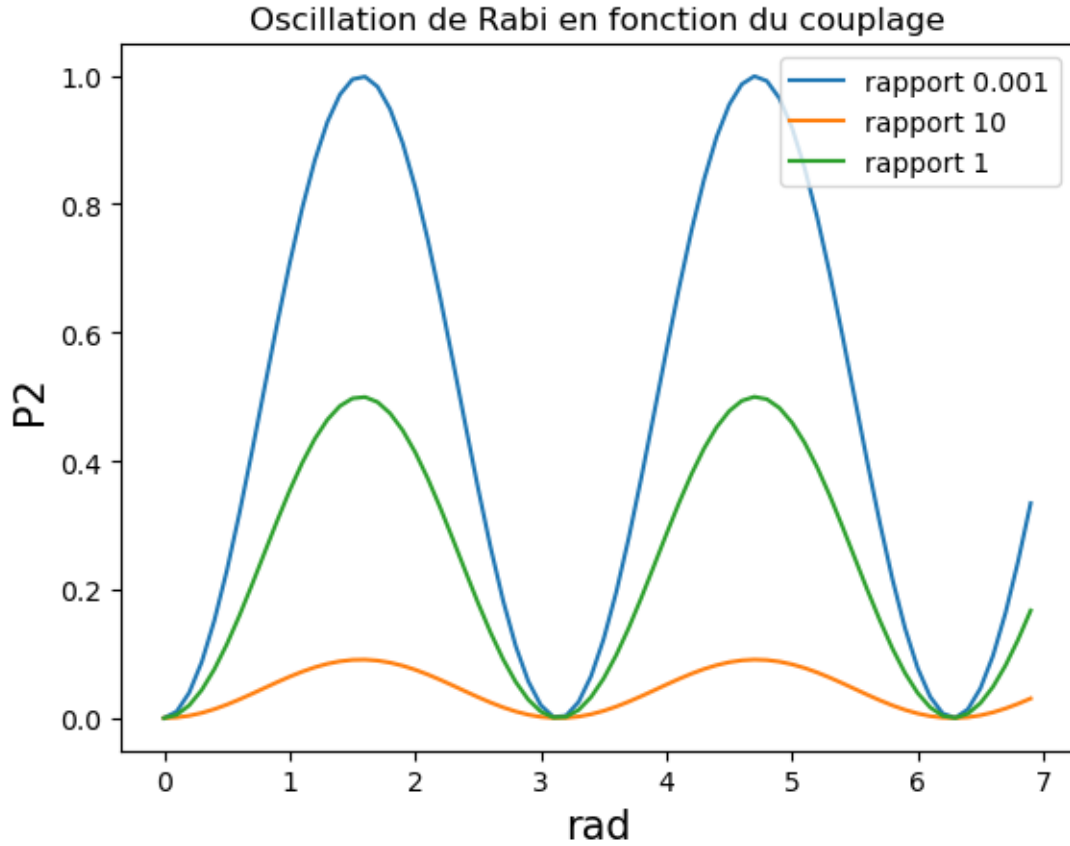


Figure 1: Oscillation de Rabi

2 Molécule d'ammoniac

2.1 Modélisation par un système à 2 niveaux

La molécule d'ammoniac peut-être modélisée par un double puits. L'écart d'énergie ($2A$) entre les deux premiers niveaux est très petit devant l'écart avec les autres niveaux d'énergie.

Dans la base $\{|\Psi_D\rangle, |\Psi_G\rangle\}$ (état droit et état gauche) le Hamiltonien est le même que précédemment. Avec $E_1 = E_2 = E_0$.

Pour tenir compte de la perturbation due à l'effet tunnel on rajoute une perturbation comme dans la partie précédente avec $W=A$.

On peut alors appliquer les calculs de la partie précédente à cet exemple. On trouve comme probabilité de mesurer le système dans l'état gauche si on était parti de l'état droit à $t=0$:

$$\mathcal{P}_G = \sin^2\left(\frac{\Omega_1 t}{2\hbar}\right)$$

avec $\Omega_1 = \frac{2A}{\hbar}$ la pulsation de Bohr du système.

On peut donc en conclure que la molécule s'inverse de manière périodique.

2.2 Champ électrique oscillant

Principe du MASER : On commence par préparer les molécules dans l'état antisymétrique (qui est un état excité). On oblige ensuite ces molécules à restituer leur énergie $2A$ en retombant dans l'état fondamental symétrique. Cela se fait spontanément mais sur des durées très longues, de l'ordre du mois.

On stimule alors cette émission en soumettant ces molécules à un champ électrique oscillant : $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t)$.

La perturbation est : $W = \vec{D} \cdot \vec{E}$

On refait le même raisonnement que nous faisons depuis le début : on pose un vecteur d'état général et on regarde son évolution grâce à l'équation de Schrödinger.

Dans les équations différentielles qui en découlent on effectue l'approximation séculaire (on néglige les termes oscillants rapidement).

On calcule la probabilité de trouver le système dans l'état symétrique à un temps t . On a des oscillations de Rabi mais P_{\max} a un caractère raisonnant.

Conclusion

Voilà voilà (ne surtout pas conclure comme ça, très mauvaise idée).

Je pensais conclure sur le MASER en étant persuadée de ne pas avoir le temps de le traiter. J'ai finalement eu un peu de temps mais pas assez. En appliquant les résultats de la partie 1.2 sur la molécule d'ammoniac directement (ce que je n'avais pas fait, j'avais redémontré la formule de Rabi), cela serait possible de traiter cette dernière sous-partie.

Peut-être conclure sur une autre utilisation de ces oscillations : la RMN.

3 Questions

- Est-ce que l'on peut toujours chercher les valeurs propres du Hamiltonien ? Non, pas quand le Hamiltonien dépend du temps.
- Comment s'assurer qu'à $t=0$ on est dans l'état souhaité ? Faire une mesure
- Pourquoi pas de termes diagonaux dans la perturbation ? Ça changerait juste l'origine de E .
- Qu'est-ce que le double puits de la molécule d'ammoniac ? Interaction coulombienne entre les atomes.
- Pourquoi modélisation par un système à 2 niveaux ? Approximation de Boltzmann T petite donc les autres niveaux ne sont pas accessibles.
- Pourquoi pas étudier un système à 1 niveau ? Pas intéressant lorsque H ne dépend pas du temps.
- Est-ce qu'un ket dépend toujours du temps ? Est-ce que ça peut aussi dépendre de l'espace ? Non pas toujours, si représentation de Heisenberg c'est l'observable qui dépend du temps et sinon ça ne peut pas dépendre d'autre chose et surtout pas de l'espace.

- Comment passer de Schrödinger stationnaire à Schrödinger dépendant du temps ?
- A-t-on toujours $\langle 1|+\rangle = \langle +|1\rangle$? Que quand on est en réel.
- Qu'est-ce que la pulsation de Bohr ?
- Exemple d'un système intrinsèquement à 2 niveaux ? Spin de l'électron.
- Autres exemple de l'oscillation avec Résonance ? RMN
- Pourquoi les vecteurs propres sont orthogonaux pour l'hamiltonien ? H hermitien c'est le théorème spectral.
- Si dans W les coef sont complexes, quelle propriété pour les coef de l'antidiagonale ? Ils sont complexes conjugués pour que H soit hermitien.
- Le double puits de potentiel s'applique à quelle particule ? A la particule fictive composée des 3 hydrogènes dans le champ crée par l'azote.

4 Remarques

- Dire qu'il y a deux types de systèmes à deux niveaux : ceux qui sont intrinsèquement à deux niveaux (le spin des électrons) et ceux pour lesquels les niveaux supérieurs ne sont pas accessibles (la molécule d'ammoniac).
- Pour ma deuxième partie j'ai refait les calculs que j'avais déjà fait dans la première partie. Il serait mieux de directement appliquer les résultats de la partie sur les oscillations de Rabi à la molécule d'Ammoniac ce qui laisserait plus de temps pour le couplage dépendant du temps.
- Deux exemples classiques pour cette leçons : la RMN ou la molécule d'ammoniac. Il faut savoir parler de l'autre exemple pour les questions.
- D'autres exemples : (Traité dans le Cohen) Benzène, liaison chimique de H_2^+