

Titre : LPQ5 : système quantiques à deux niveaux

Présentée par : MOULIN Damien

Rapport écrit par : MESTRE Eloïse

Correcteur : Hare Jean

Date : 17/02/2020

Bibliographie de la leçon :

Titre	Auteurs	Éditeur	Année
Mécanique quantique tome1	C.Cohen-Tannoudji et al.	Hermann	1997
Mécanique quantique 3	Claude Aslangul	DeBoeck	2009
12 leçons de mécanique quantique	Jean-Louis Basdevant	Vuibert	2006

Plan détaillé

Niveau choisi pour la leçon : L3

Pré-requis : Equation de Schrödinger, formalisme de Dirac, facteur gyromagnétique

I-Spin 1/2

II- Etude générale des systèmes quantiques à deux niveaux

III- Application : résonance magnétique nucléaire

Intro : (2min) Cette leçon s'inscrit juste après celle sur le formalisme de Dirac dans laquelle on a vu que pour décrire l'évolution d'un système quantique il fallait trouver les valeurs propres et états propres de l'Hamiltonien. On va maintenant mettre ce formalisme à la résolution d'un système quantique à 2 niveaux.

Pourquoi syts à 2 nv ? Pcq c'est un syst simple mais intéressante et fréquent (de manière stricte ou en approximation).

I-Spin 1/2

1)Quantification du moment magnétique (~ 8 min)

Résultats expérimentaux : Expérience de Stern et Gerlach **#Slide**

Interaction d'atomes d'argent possédant un moment m_g avec un gradient de champ magnétique.

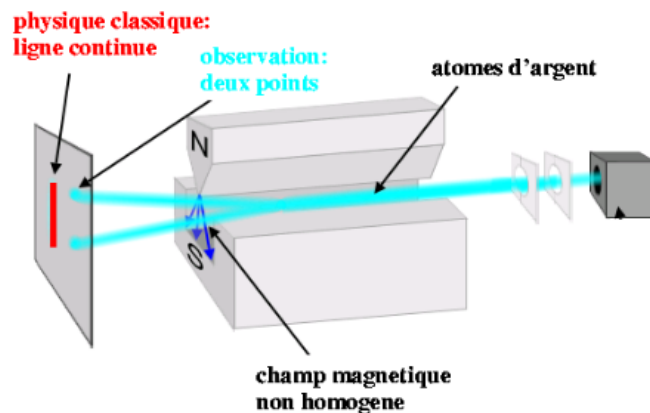
Or $M = \chi S$ où S est le moment m_g intrinsèque des atomes. << pas de rôle dans la description de la manip

On mesure la position des atomes (et donc indirectement le moment cinétique) sur une plaque.

Classiquement on s'attend à une distribution rectiligne des positions : la position la plus haute étant celle correspondant au moment magnétique aligné avec le champ B et la position la plus basse celle correspondant au moment magnétique anti-aligné avec le champ B .¹

Or on observe expérimentalement seulement 2 points, ceux correspondant au deux cas extrêmes précédents.

¹ Oui, mais ce qui compte pour savoir le sens de déflexion c'est la gradient du champ



Pour ~~comprendre~~ décrire ce phénomène on a besoin d'un opérateur ~~de mesure et d'un formalisme~~ : décrivant un moment cinétique à deux valeurs propres ($j=1/2$ donc $2j+1=2$)

Soit $\hat{S}_{\vec{u}}$ l'opérateur de ~~mesure du~~ moment cinétique sur l'axe de direction définie par le vecteur unitaire \vec{u} .

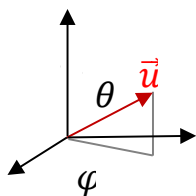
L'opérateur \hat{S}_z (\vec{u} pour suivant l'axe z) possède 2 valeurs propres non dégénérées ($\pm \hbar/2$) et donc deux vecteurs propres $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$ qui forment une base de ~~nos~~ l'espace vectoriel des états.

Dans cette base on peut donc écrire $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$.

On admet que dans cette même base, $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ et $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ (ce sont les 3 matrices de Pauli). Et pour tout \vec{u} on peut ~~mesurer~~ écrire le moment cinétique ~~grâce à~~ comme une combinaison linéaire des matrices de Pauli. (en coordonnées sphériques θ, φ)

#Slide

$$\hat{S}_{\vec{u}(\theta;\varphi)} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{bmatrix} = \cos \theta \hat{S}_z + \sin \theta \cos \varphi \hat{S}_x + \sin \theta \sin \varphi \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$



Dont les vecteurs propres sont

$$\begin{aligned} |+\rangle_u &= +\cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} e^{+\frac{i\varphi}{2}} |-\rangle_z \\ |-\rangle_u &= -\sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} |+\rangle_z + \cos \frac{\theta}{2} e^{+\frac{i\varphi}{2}} |-\rangle_z \end{aligned}$$

Transition : Maintenant qu'on a les outils, regardons le comportement du spin 1/2 dans un champ

1)Précession de Larmor (~ 9 min)

Soit une particule de spin 1/2 dans un champ $\vec{B} = B_0 \vec{u}_z$ dont l'état $|\Psi(t)\rangle = a(t)|+\rangle_z + b(t)|-\rangle_z$

En Classique : $E_p = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -M_z B_0 = -\gamma B_0 S_z$

En Quantique : $H = -\gamma B_0 S_z = \omega_0 S_z$ les v.p. de H sont $\pm \frac{\hbar \omega_0}{2}$ et les v.p. sont ceux de S_z

Pour étudier l'évolution on applique l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$ soit avec

$$|\psi\rangle = a|\psi\rangle_{zz} + b|\psi\rangle_z$$

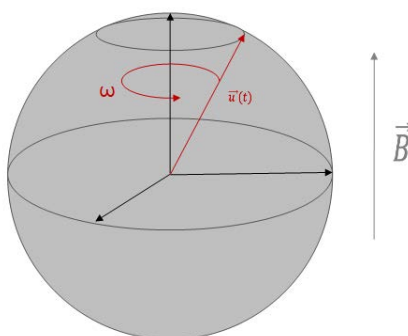
Les deux équations différentielles indépendantes $i \frac{da}{dt} = \frac{\omega_0}{2} a$ et $i \frac{db}{dt} = -\frac{\omega_0}{2} b$

Donc $a = a_0 e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}}$ et $b = b_0 e^{+i\frac{\omega_0 t}{2}}$ Soit finalement $|\psi\rangle(t) = a_0 e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |\psi\rangle_z + b_0 e^{+i\frac{\omega_0 t}{2}} |\psi\rangle_z$

Que l'on peut réécrire $|\psi\rangle(t) = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_0 - \omega_0 t}{2}} |\psi\rangle_z + b_0 e^{+i\frac{\varphi_0 - \omega_0 t}{2}} |\psi\rangle_z$

Donc l'état de la particule est décrit par l'état $|+\rangle_u$ où \vec{u} précesse autour de l'axe z :

#Slide



$$w_{12} = w_{21}^*$$

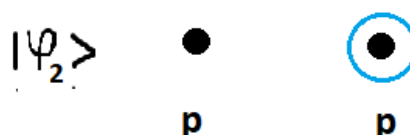
Transition : Dans cet exemple \hat{H} était diagonal , les états étaient découplés mais ce n'est pas le cas en général.

II- Etude générale des systèmes quantiques à deux niveaux

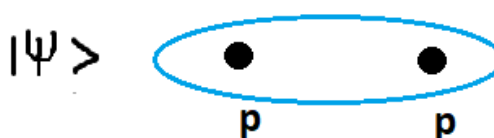
1) Etude générale (statique) (~7 min)

Nous chercherons à comprendre la liaison chimique dans le cas de H_2^+ , c'est à dire le cas où l'électron est délocalisé sur les 2 protons.

Soient deux état non couplés :



L'état décrivant la liaison chimique est :



On a besoin d'un hamiltonien qui couple les deux états ϕ_1 et ϕ_2 , il faut donc ajouter au hamiltonien précédent un autre terme non diagonal \hat{H}_1 que nous choisissons purement antidiagonal.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} \\ w_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

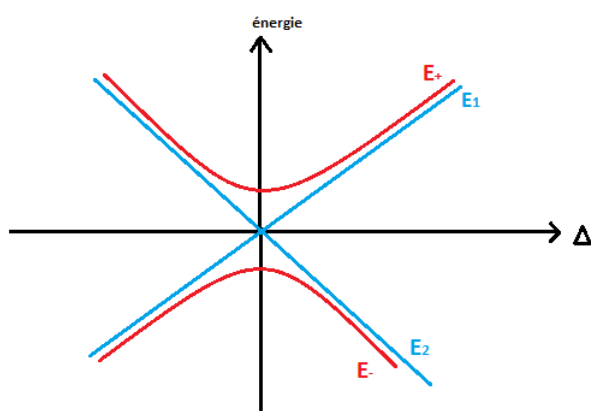
\hat{H} a comme valeurs propres E_+ (vp ϕ_1) et E_- (vp ϕ_2).

On trouve :

$$E_{\pm} = E_m \pm \sqrt{\Delta^2 + |w_{12}|^2}$$

$$E_m = \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$$

$$\Delta = \frac{1}{2}(E_1 - E_2)$$



Remarques :

- ∝ $|E_+ - E_-| > |E_1 - E_2|$ le couplage éloigne les niveaux d'énergie entre eux
- ∝ l'effet de couplage est d'autant plus fort que $|\Delta|$ est petit.
- ∝ L'état couplé H_2^+ est plus favorable énergétiquement (E_-) que l'état où l'électron est localisé sur un proton.

2) Aspect dynamique (~6 min)

On va résoudre l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & w_{12} \\ w_{21} & E_2 \end{pmatrix}$$

2 vap E_+ et E_- et 2 vp $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ qui forment une base.

Si initialement le système se trouve dans l'état $|\phi_1\rangle$ qui peut se décomposer dans la base des états stationnaires $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$: $|\Psi(t=0)\rangle = |\phi_1\rangle = a_0|\Psi_1\rangle + b_0|\Psi_2\rangle$

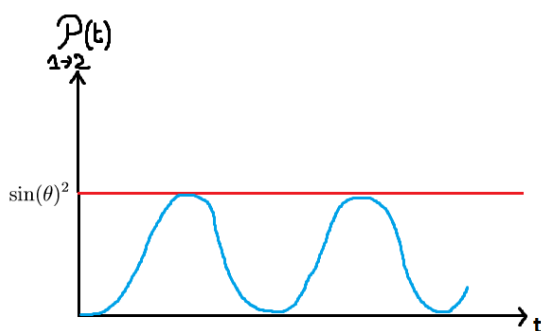
on peut réécrire a_0 et b_0 et :

$$|\phi_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp i \frac{\phi}{2} |\psi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} \exp i \frac{\phi}{2} |\psi_2\rangle$$

Alors : $|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp i \left(\frac{\phi}{2} - \frac{E_+}{\hbar} t \right) |\psi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} \exp i \left(\frac{\phi}{2} + \frac{E_+}{\hbar} t \right) |\psi_2\rangle$

On voit alors que la probabilité de se retrouver dans l'état de spin opposé $|\phi_1\rangle$ n'est pas nulle !

$$| \langle \phi_2 | \psi(t) \rangle |^2 = P_{\phi_1 \rightarrow \phi_2}(t) = \sin(\theta)^2 \sin^2 \left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar} t \right) \neq 0$$



Oscillations de Rabi (dûes au couplage)

Transition : cette oscillation permet de comprendre la RMN

III- Application : résonance magnétique nucléaire

1) Mise en œuvre (~6 min)

- 2) Lorsque l'on veut analyser une molécule contenant des H, on la met dans un champ magnétique constant $\vec{B} = B_0 \vec{u}_z$, elle va alors acquérir une aimantation. On envoie ensuite une onde EM (E_1, B_1) de pulsation ω de sorte à annuler cette aimantation.

$$\hat{H} = w_0 \hat{S}_z + w_1 (\cos(wt) \hat{S}_x + \sin(wt) \hat{S}_y) \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} w_0 &= B_0 \gamma \\ w_1 &= B_1 \gamma \\ w &= \text{freq}(B_1) \end{aligned}$$

En se plaçant dans le référentiel du champ tournant, on peut trouver un hamiltonien stationnaire de ce système :

#Slide

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\Delta w & w_1 \\ w_1 & \Delta w \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \Delta w = w - w_0$$

1) Renversement de l'aimantation (~4 min)

On suppose qu'à l'instant initial le système est dans l'état $|+\rangle_z$.

On peut montrer qu'à l'instant t :

$$P_{|+\rangle_z \rightarrow |-\rangle_z}(t) = \frac{w_1^2}{w_1^2 + \Delta w^2} \sin^2(\sqrt{w_1^2 + \Delta w^2} * t)$$

$$P_{|+\rangle_z \rightarrow |-\rangle_z}(t) = \sin^2(w_1 t) \quad \text{Lorsque } w=w_0, \Delta w=0 \text{ et}$$

L'aimantation s'annule en moyenne.

Conclusion : !calculs qui permettent de comprendre la RMN.

Questions posées par l'enseignant

- ⌘ 2 vap pour S_z ça sort d'où ?
- ⌘ Justifiez d'où sortent les matrices de Pauli.
- ⌘ Facteur gyromagnétique ? Facteur de Landé ? Ce dernier dépend de quoi ?
- ⌘ Que vaut le facteur de Landé pour les atomes d'argent ?
- ⌘ Dans l'exemple de H_2^+ , c'est quoi E_1 et E_2 ?
- ⌘ Dans le cadre de la liaison chimique, on peut avoir $E_1 \neq E_2$?
- ⌘ Quels sont les états pour $\Delta=0$?
- ⌘ L'état symétrique pour H_2^+ est liant, physiquement pourquoi ?
- ⌘ Dans la RMN, le champ mg polarise les protons, pourquoi pas les électrons ?
- ⌘ Qu'est-ce qui vous permet de dire que l'aimantation s'annule en moyenne et quelle moyenne ?
- ⌘ C'est quoi l'aimantation en termes de matrice de Pauli ? Qu'elle est sa valeur en fonction du tps ?
- Comment l'observe-t-on ? dure-t-elle indéfiniment ? C'est quoi T_1 et T_2 ?

Leçon difficile, essayer de faire plus de calculs avec du sens au tableau.

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)

Cette leçon est relativement difficile, car il faut se placer au bon niveau, et prendre un certain recul. Ici le choix de traiter 3 fois le (presque) même problème dénote un relatif manque de recul, et l'intérêt de la leçon en pâtit.

L'étude de la liaison chimique serait un exemple pertinent si la nature physique des effets mis en jeu était au rendez-vous.

L'oscillation de Rabi pourrait être exploitée/interprétée de façon plus approfondie

Le recours aux transparents pour ne pas s'appesantir sur les calculs est pertinent à faible dose, mais ne doit pas devenir trop systématique.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Cette leçon est assez délicate car il y a une multitude d'approches possible. Elle est le plus souvent abordée sous l'angle d'attaque du double puits (avec couplage tunnel) et plus précisément de la molécule d'ammoniac, ce qui est pertinent si les effets essentiels sont bien mis en évidence, mais lassant à force de répétitions.

Le recours à la liaison moléculaire diatomique est une alternative intéressante mais les effets physiques et le cadre de la modélisation doivent être plus fermement établis. Notamment, il faut mettre en évidence les 2 niveaux et dans quelle mesure ils sont faiblement couplés.

Il n'est pas satisfaisant de parler longuement de RMN sans parler de relaxation, et sans introduire les temps T_1 et T_2 .

Les points incontournables sont naturellement - la justification, même sommaire du modèle des 2 niveaux - la levée de dégénérescence liée au couplage avec le « croisement évité » (présenté ici), - et l'oscillation de Rabi (hors résonance), qui n'est qu'un avatar de la précession de Larmor.

Dans ce cadre il peut être intéressant de montrer que tout système à deux niveaux peut être représenté par un spin 1/2 (modèle du spin fictif, cf appendice au chapitre III dans le poly de JH).

De façon optionnelle, on peut aussi aborder la question –plus avancée – du passage adiabatique et des transitions associées (modèle de Landau-Zener)

Expériences possibles (pas au programme de l'agrégation docteur)

Pas de suggestion. Depuis que le cas classique n'est plus dans le sujet de la leçon, les reurs au oscillateurs coupés n'a plus de pertinence.

Bibliographie conseillée

RAS par rapport à celle suggérée, hormis Landau – Zener qui est ... dans le Landau

