

Leçon de physique n° 43:
Evolution temporelle d'un
système quantique à
2 niveaux

Niveau : licence

- Pré-requis :
- * formalisme ondulatoire de la MQ
 - * LP39 & 40 (puits de potentiel, confinement et effet tunnel)
 - * algèbre et formalisme de Dirac
 - * bases de fonctionnement laser (lycée)

I - Un système à 2 niveaux d'énergie : la molécule d'ammoniac

- 1) Double puits
- 2) Etats stationnaires, effet tunnel

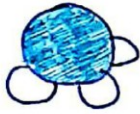
II - Evolution temporelle

- 1) Inversion spontanée de la molécule
- 2) Réaction à un champ oscillant
- 3) Principe du Maser

I / Un système à 2 niveaux d'énergie : la molécule d'ammoniac

1 / Double puits

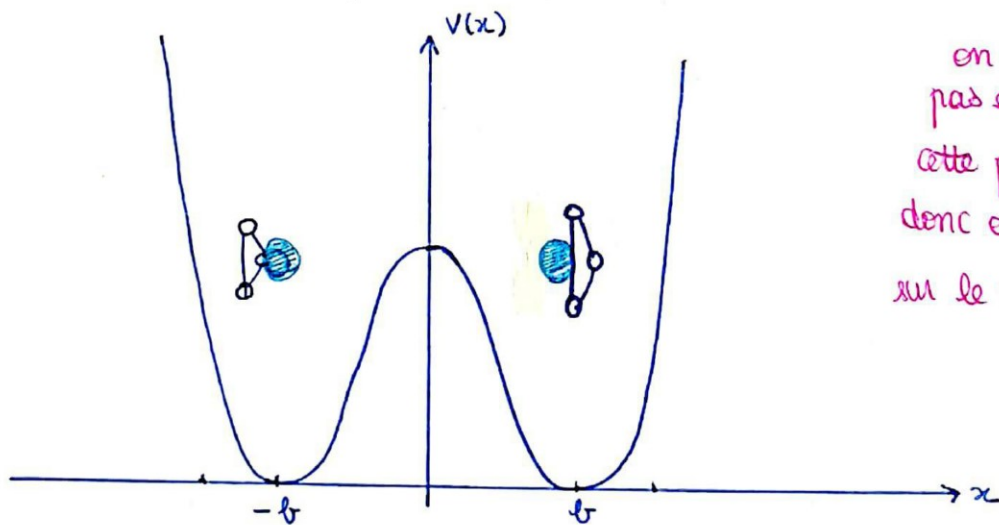
Dans ses états de plus basse énergie, la molécule d'ammoniac NH_3 a une forme pyramidale : un atome d'azote au sommet et 3 atomes d'hydrogène à la base formant un triangle équilatéral.



Cette molécule est constituée de 14 particules (4 noyaux et $10 e^-$), il y a beaucoup de mouvements possibles. On considérera que la molécule a 0 impulsion et que l'on peut négliger ses vibrations. Cela définit quasiment l'état de la molécule à l'exception d'un paramètre : la position du plan des 3 H par rapport à N. Mais les mouvements de plus basse énergie, correspondent au déplacement du plan des 3 atomes d'hydrogène par rapport à l'atome d'azote le long de l'axe de symétrie de la molécule.

Cet axe sera appelé axe x et les 3 atomes d'hydrogène seront regroupés par la pensée par le terme "particule". Lorsque l'abscisse x du plan des 3 hydrogènes se déplace le long de $x > 0$, l'énergie potentielle de la molécule a un minimum. Mais la molécule peut se retourner comme un parapluie et il existe une autre configuration stable symétrique pour x négatif.

Entre les 2 on trouve la configuration instable où les 4 atomes sont coplanaires qui correspond à un maximum d'énergie potentielle.

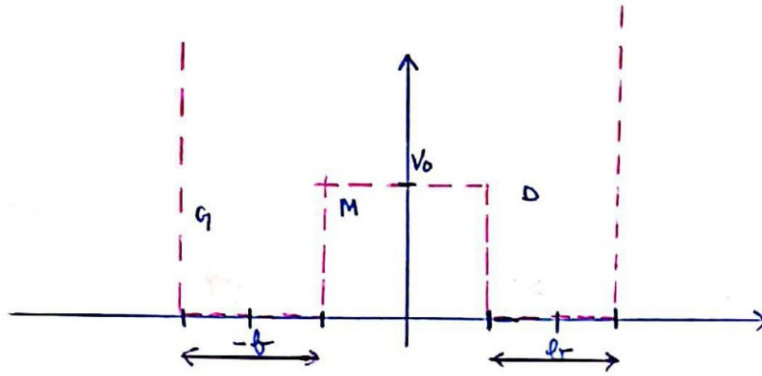


on ne sait pas quelle est cette particule donc on peut raisonner sur le mm⁺ dipolaire

⚠ Ces deux configurations ne sont pas équivalentes car la molécule possède un moment cinétique intrinsèque qui permet de définir la droite et la gauche. on est pas ici dans le cas où la molécule se serait simplement "retournée".

sinon on dit que la molécule tourne -

Pour comprendre la physique d'un tel système, nous allons approximer le double puits à un modèle de double puits carré.



→ oscillations spatiales de la fonction d'onde.

si l'énergie de la "particule" est supérieure à la hauteur V_0 de la barrière ($E > V_0$) il se produit des oscillations périodiques. Mais lorsque $E < V_0$, pour une valeur donnée de E , il y a 2 configurations d'équilibre possible. Si on sait que classiquement la molécule ne peut passer d'une position d'équilibre à l'autre, on se pose-t-il quantiquement ? Exprimez des états stationnaires. Sait qu'en quantique une particule peut franchir une barrière classiquement la particule ne peut pas franchir la barrière : $E < V_0$

On considère les états d'énergie d'une particule de masse m tels que classiquement la particule ne peut pas franchir la barrière : $E < V_0$

De manière analogue à ce qui a été fait dans les leçons 39 et 40 on définit :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

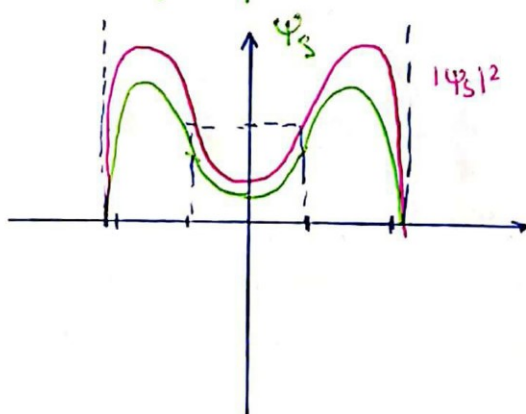
et les fonctions propres de l'hamiltonien s'écrivent sous la forme :

Région G : $\psi(x) = \pm \lambda \sin[k(b + \frac{a}{2} + x)]$

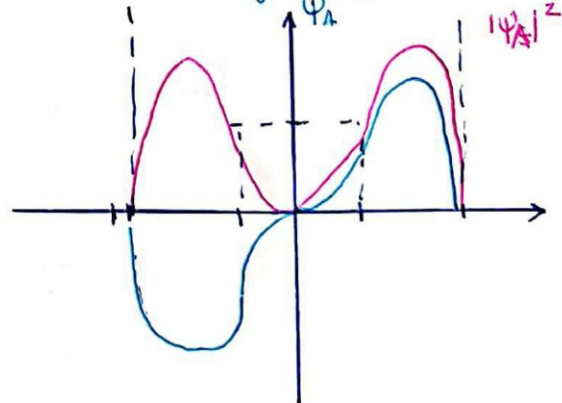
Région M : $\psi(x) = \begin{cases} \mu \cosh(Kx) & \text{solution symétrique} \\ \mu \sinh(Kx) & \text{solution antisymétrique} \end{cases}$

Région D : $\psi(x) = \lambda \sin[k(b + \frac{a}{2} - x)]$

solution symétrique $\psi_3(x)$



solution antisymétrique



On remarque que, dans tous les états stationnaires, la particule a la même probabilité d'être à droite ou à gauche. ③

On associera l'énergie E_A à l'état stationnaire anti-symétrique et E_S à l'état stationnaire symétrique

II /

1/ \rightarrow fonction d'onde, à ne pas forcément faire

Comment mettre quantiquement la particule à droite ou à gauche? Il faut la préparer de telle façon que sa fonction d'onde soit concentrée à droite ou à gauche. Nous pouvons et savons le faire grâce au principe de superposition.

ainsi on a : $\psi_D = (\psi_S + \psi_A) / \sqrt{2}$ $\psi_G = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_S - \psi_A)$

Prenons une particule initialement préparée à droite et appliquons ce que nous savons sur l'évolution dans le temps d'un système quantique à cette particule.

$$\psi_D(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_S(x) e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} + \psi_A(x) e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} \right)$$

$$\psi_D(x, t) = \frac{e^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left(\psi_S(x) + \psi_A(x) e^{-i(E_A - E_S)t/\hbar} \right)$$

on remarque que : $\psi_D(x, \frac{\pi\hbar}{E_A - E_S}) = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} (\psi_S(x) + \psi_A(x) e^{-i\pi})$

$$\psi_D(x, \frac{\pi\hbar}{E_A - E_S}) = \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} (\psi_S(x) - \psi_A(x))$$

$$\psi_D(x, \frac{\pi\hbar}{E_A - E_S}) = e^{-i\phi} \psi_G(x)$$

la particule est à gauche!

\rightarrow petit couplage -

L'effet tunnel et la superposition d'états, 2 phénomènes purement quantiques, conduisent à une oscillation permanente entre les 2 puits à la pulsation $\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar} = \frac{24}{\hbar}$

\rightarrow on a des mesures tellement précises \hbar qu'on ne cherche pas à les calculer
d'où une fréquence $\nu = 24$ 000 MHz, une longueur d'onde $\lambda = 1,25$ cm.

\hookrightarrow phénomène découvert et expliqué à partir des années 1940-45 (WWII et radars)
et exploitée à partir des années 1950 pour réaliser l'ancêtre du laser

Ré-étudions l'oscillation précédente mais dans le formalisme de Dirac.

On peut écrire

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) \quad \text{et} \quad |\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle)$$

ou de manière générale : $|\psi\rangle = a|\psi_S\rangle + b|\psi_A\rangle$: car $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ forment un système complet de fonctions physiques où le vecteur d'état $|\psi\rangle$ de la molécule se trouve dans un sous espace de dimension 2 de l'espace de Hilbert. : nous ne nous intéressons qu'aux situations

C'est ce type de situation que l'on appelle système à 2 états ou encore système à 2 niveaux.

D'après le théorème spectral, il existe un ensemble de niveaux d'énergie E_n et de fonctions propres ψ_n correspondantes.

tous les $|\psi_n\rangle$ sont engendrés par $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$, et les 3 premiers sont donnés figure 7.5.

→ on ne considère que les états de + basse énergie donc

On note E_0 entre les 2 énergies E_A et E_S et $A = E_A - E_S$

→ ψ_S a une énergie $E_0 - A$
 ψ_A $E_0 + A$.

dans la base $|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle$ on a donc $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$

Opérateur \hat{X} : "disposition par rapport au centre de la matrice"

$$\hat{X} = x_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad x_0 \simeq \text{position des minima du puits double.}$$

→ les états propres de \hat{H} ne sont pas E.P de \hat{X}

$$\hat{X} = x_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{dans } \{|\psi_0\rangle, |\psi_n\rangle\}$$

et étudions l'évolution temporelle de $|\psi_0(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-iE_S t/\hbar} \\ e^{-iE_A t/\hbar} \end{pmatrix}$

$$\langle X \rangle = \langle \psi_0(t) | \hat{X} | \psi_0(t) \rangle = \frac{1}{2} \times 2x_0 \operatorname{Re} (e^{-i(E_S - E_A) t/\hbar}) = x_0 \cos(\omega t)$$

→ on retrouve bien le mouvement d'inversion de la molécule.

Principe de fonctionnement du Maser (microwave amplification by stimulated emission of radiation) ⑨

Rappel sur le fonctionnement d'un laser : acronyme en anglais
Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

Le principe est de faire redescendre des atomes d'un niveau d'énergie E_e excité à un niveau plus bas E_0 en les faisant interagir avec un photon accordé à la fréquence ω telle que $E_e - E_0 = \hbar \omega$.

→ émission stimulée (Einstein 1916)

La préparation de ces atomes dans un état excité s'appelle l'inversion de population.

Pour le Maser, le principe est le même. On prépare les molécules de NH_3 dans l'état $|\psi_A\rangle$ asymétrique qui serviront à l'émission stimulée en les sélectionnant grâce à un système faisant intervenir un champ quadripolaire fixe.

L'émission stimulée est provoquée par l'interaction avec un photon accordé que l'on peut voir aussi comme l'interaction avec un champ électrique oscillant à la bonne fréquence.

Voyons comment cette émission stimulée peut avoir lieu :

Plongeons notre molécule dans un champ oscillant : $\vec{E} = E_0 \cos(\omega t) = E_0 \cos(\omega t) \vec{e}_x$.

L'énergie du dipôle \vec{d}_0 associé à la molécule plongée dans ce champ oscillant vaut $-\vec{d}_0 \cdot \vec{E}_0 \cos(\omega t)$

On pose $\eta = \vec{d}_0 \cdot \vec{E}_0$ *garder d_0 pour ne pas être embêté à propos de la charge*

L'hamiltonien associé à cette interaction est $\hat{W} = -\vec{E} \cdot \hat{\vec{d}} = -E_0 \hat{d}_x \cos(\omega t) = -E_0 \hat{d}_x \cos(\omega t)$ dans la base $\{|\psi_s\rangle; |\psi_A\rangle\}$

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & -\eta \cos(\omega t) \\ -\eta \cos(\omega t) & 0 \end{pmatrix}$$

L'hamiltonien pour le système à 2 niveaux dans le champ oscillant est donc :

$$\hat{H}_{\text{osc}} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \cos(\omega t) \\ -\eta \cos(\omega t) & E_0 + A \end{pmatrix}$$

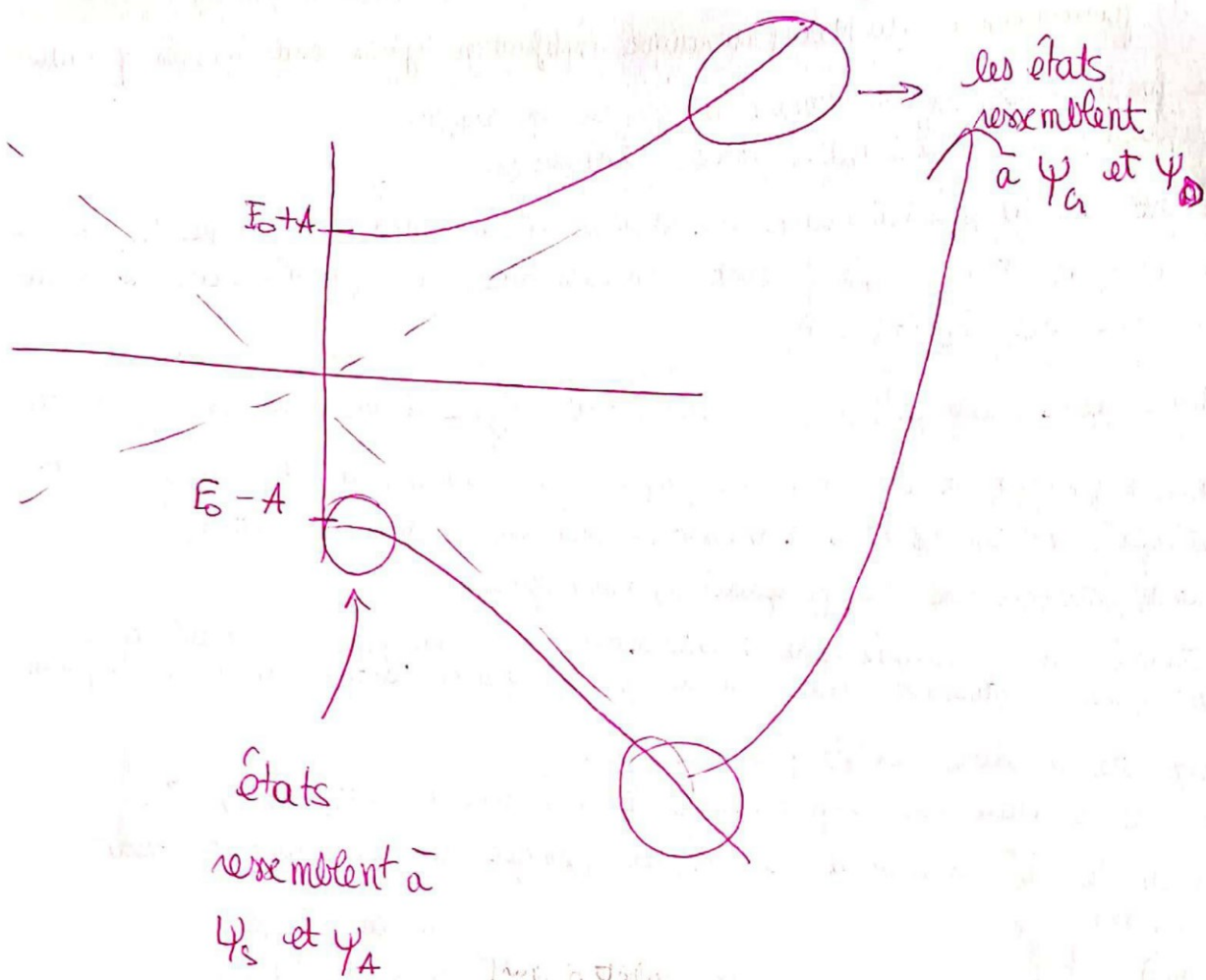
\hat{H} dépend maintenant explicitement du temps, le système n'est plus isolé et on ne peut plus faire usage des états stationnaires.

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger, c.à.d. qu'en écrivant $|\psi(t)\rangle = a(t) |\psi_s\rangle + b(t) |\psi_A\rangle$

$$\text{il faut résoudre } i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Physiquement, le système différentiel obtenu (car \hat{H} est une matrice) correspond à des oscillations forcées avec phénomène de résonance à $\omega = \omega_0$.

Au voisinage de la résonance ($\omega \sim \omega_0$), la probabilité de transition $P_{A \rightarrow S}(t)$ qu'au bout du temps t ces molécules, sous l'influence du champ oscillant, soient passées de l'état $|\psi_A\rangle$ à l'état $|\psi_s\rangle$ et se soient « vidées » de l'énergie $2A = E_A - E_s$



$$P_{A \rightarrow S}(t) \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \frac{t}{2} \right)$$

⑥

cette formule est due à Rabi.

La probabilité $P_{A \rightarrow S}(t)$ oscille dans le temps entre 0 et une valeur P_{\max} . On parle d'oscillations de Rabi.

Conclusion:

Nous avons vu au cours de cette leçon qu'un système quantique à 2 niveaux est un système dans lequel l'état peut être caractérisé par 2 états.

Il est possible pour un tel système de passer d'un état à l'autre soit spontanément, soit sous l'influence d'une excitation bien choisie.

La présence de telles oscillations entre états a connu une résonance dans de nombreux domaines de la physique et a fait progresser notre connaissance de la matière (détection de l'oscillation entre \neq états du neutrino \rightarrow 3 saveurs) et des techniques (RMN).

↓
électronique
muonique
tau.

→ Feynman

définir un système à 2 niveaux à l'aide de la polarisation (+ permet de réviser les notations de Dirac)
peut-on faire des interférences avec des photons polarisés ?

on peut faire I/ Déf avec polarisation

II/ Evolution libre NH_3

III/ Evolution forcée Spin.

+ abaissement des niveaux d'énergie

couplage des 2 puits \rightarrow levée de dégénérescence ~~+ couplage~~ \rightarrow on doit parler de molécule de H_2^+ \Rightarrow e^- délocalisé.