Mécanique quantique – L3

Pierre-François Cohadon - Tristan Villain - Qinhan Wang

TD 3 - 04/10/2024

Résonance magnétique nucléaire

---

1 Exercice préliminaire : spin 1/2 et sphère de Bloch

Soit $\widehat{\mathbf{S}}$ un spin 1/2 et $\mathbf{u}$ un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$. On pose $\widehat{S}_{\mathbf{u}} = u_x\widehat{S}_x + u_y\widehat{S}_y + u_z\widehat{S}_z$.

1. À quelle observable physique $\widehat{S}_{\mathbf{u}}$ correspond-elle ?
2. Diagonaliser $\widehat{S}_{\mathbf{u}}$ dans la base $|\pm\rangle_z$ où $\widehat{S}_z$ est diagonale. On notera $|\pm\rangle_{\mathbf{u}}$ les vecteurs propres correspondants.
3. Déduire de la question précédente que tout état d'un spin 1/2 peut être décrit par un vecteur $|+\rangle_{\mathbf{u}}$. En déduire que tout état d'un spin 1/2 peut être représenté comme un élément d'une sphère baptisée sphère de Bloch.

2 Résonance magnétique d'un spin $\frac{1}{2}$

2.1 Interaction entre un spin et un champ magnétique

En plus de leur moment magnétique orbital, les particules possèdent un moment magnétique associé à un moment cinétique intrinsèque $\widehat{\mathbf{S}}$, appelé *spin*, les deux étant reliés par le facteur gyromagnétique de spin γ_{s} : $\widehat{\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{S}}} = \gamma_{\mathrm{s}}\widehat{\mathbf{S}}$.
On supposera par la suite que le hamiltonien se réduit à l'interaction avec $\widehat{\mathbf{S}}$:

$$\widehat{H} = -\widehat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\gamma_{\mathrm{s}}\widehat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}.$$

On rappelle l'expression des matrices de Pauli :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1. Exprimer le hamiltonien en fonction de $\omega_{\mathrm{L}} = -\gamma_{\mathrm{s}}B > 0$ et de $\widehat{\sigma}_{\mathbf{u}}$, matrice de Pauli associée à la direction $\mathbf{u}$ du champ magnétique.
2. En déduire l'opérateur d'évolution $\widehat{U}(t,0)$ entre les instants 0 et t du spin dans ce champ magnétique. On utilisera le fait que $\widehat{\sigma}_{\mathbf{u}}^2 = 1$.
3. Donner son expression matricielle explicite pour $\mathbf{u} = \cos\theta\,\mathbf{e}_z + \sin\theta\,\mathbf{e}_x$.

2.2 Interaction avec un champ tournant

On considère maintenant un spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique dépendant du temps :

$$\mathbf{B}(t) = B_0\,\mathbf{e}_z + B_1(\cos\omega t\,\mathbf{e}_x + \sin\omega t\,\mathbf{e}_y),$$

superposition d'un champ statique $\mathbf{B}_0$ parallèle à (Oz) et d'un champ $\mathbf{B}_1$ tournant à la pulsation ω dans le plan (xOy).

4. Écrire $\widehat{H}(t)$ dans ce cas. On introduira les paramètres $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$.

Ce hamiltonien dépendant du temps, la compréhension de la dynamique du spin ne peut pas se faire simplement en faisant appel aux états stationnaires du hamiltonien. On cherche donc à se ramener à un hamiltonien indépendant du temps par une transformation unitaire.
On notera le ket le plus général de l'espace des spins sous la forme :

$$|\Psi(t)\rangle = a(t)\,|+\rangle_z + b(t)\,|-\rangle_z\,.$$

5. Ecrire les équations différentielles couplées satisfaites par $a(t)$ et $b(t)$.

6. Montrer que ces équations deviennent à coefficients indépendants du temps si on fait le changement de variables :

$$\begin{pmatrix} \widetilde{a} \\ \widetilde{b} \end{pmatrix} = e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}}\,a \\ e^{-i\frac{\omega t}{2}}\,b \end{pmatrix}.$$

2.3 Champ magnétique effectif

7. Montrer que le problème correspond maintenant à l'évolution d'un spin $\frac{1}{2}$ en présence d'un champ magnétique effectif $\mathbf{B}_\mathrm{e}$ indépendant du temps et situé dans le plan (xOz). Préciser la tangente de l'angle θ qu'il fait avec (Oz) et montrer que son amplitude correspond à :

$$\omega_e = -\gamma_\mathrm{s} B_\mathrm{e} = \sqrt{(\omega-\omega_0)^2 + \omega_1^2}.$$

8. Donner l'expression explicite de l'opérateur $U(t,0)$ associé à ce nouvel hamiltonien dans la base tournante ainsi que dans la base initiale.

2.4 Résonance exacte - Oscillation de Rabi

9. On suppose $\omega = \omega_0$. Que vaut alors l'angle θ ? Déterminer $U(t,0)$ dans ce cas.

10. On suppose qu'à $t = 0$, le spin est préparé dans l'état $|+\rangle_z$. Quelle est la probabilité de le trouver dans l'état $|-\rangle_z$ en fonction du temps t ?

11. On arrête l'interaction avec le champ $\mathbf{B}_1$ au bout d'un temps τ tel que $\omega_1\tau = \frac{\pi}{2}$. Quel est l'état final du spin ?

2.5 Excitation du spin hors résonance

12. On ne suppose plus $\omega = \omega_0$. À $t = 0$, le spin est préparé dans l'état $|+\rangle_z$. Quelle est la probabilité de le trouver dans l'état $|-\rangle_z$ en fonction du temps t ?

13. Tracer la probabilité d'excitation maximale en fonction de ω. Quelle est la largeur de la résonance ?