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

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

2. Réécrire les énergies propres en fonction de ces variables, 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 rapelle 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.