

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

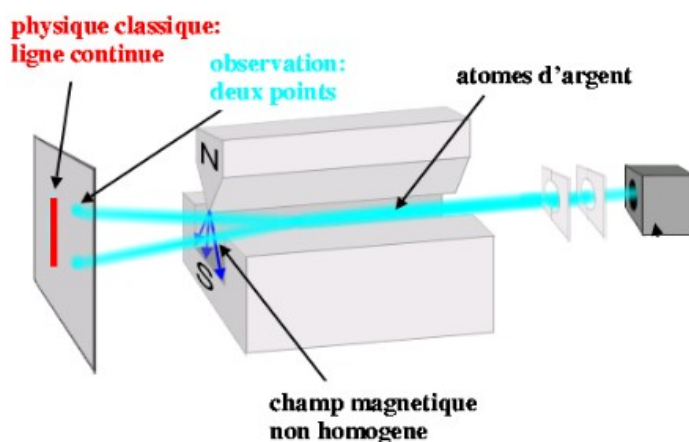
Intro : (2min) Cette leçon s'inscrit juste après celle sur le formalisme de Dirac dans laquelle on a vu que pour décrire l'évolution d'un système quantique il fallait trouver les valeurs propres et états propres de l'Hamiltonien. On va maintenant mettre ce formalisme à la résolution d'un système quantique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

Pourquoi sys à 2 nv ? Pcq c'est un sys simple mais intéressante et fréquent (de manière strcte 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 mg avec un champ mg inhomogène.
Or $M = \gamma S$ où S est le moment mg intrinsèque des atomes.
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 .
Or on observe expérimentalement seulement 2 points, ceux correspondant aux deux cas extrêmes précédents.

Pour comprendre ce phénomène on a besoin d'un opérateur de mesure et d'un formalisme :

Soit $\hat{S}_{\vec{u}}$: opérateur de mesure du mmt cinétique sur l'axe de direction \vec{u} .

\hat{S}_z (suivant l'axe z) a 2 valeurs propres non dégénérées ($\pm \hbar/2$) et donc deux vecteurs propres $\{|+\rangle_z; |-\rangle_z\}$ qui forment une base de nos états.

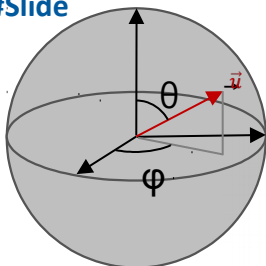
On peut donc écrire \hat{S}_z dans cette base ainsi que \hat{S}_x et \hat{S}_y (qui sont à elles 3 les matrices de Pauli) :

Questions posées par l'enseignant

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Pour tout \vec{u} , on peut mesurer le mmt cinétique grâce à une combinaison linéaire des matrices de Pauli.

#Slide



$$\vec{u} = \sin(\theta) \cos(\phi) \vec{u}_x + \sin(\theta) \sin(\phi) \vec{u}_y + \cos(\theta) \vec{u}_z$$

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

$$|+\rangle_{\vec{u}} = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |-\rangle_z$$

$$|-\rangle_{\vec{u}} = -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |+\rangle_z + \cos\frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |-\rangle_z$$

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

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 : $\hat{H} = \gamma B_0 \hat{S}_z = \omega_0 \hat{S}_z$ les valeurs propres de \hat{H} sont $\pm \omega_0 \hbar/2$ et les vecteurs propres sont ceux de \hat{S}_z :

$$\hat{H} = \omega_0 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Equation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle$$

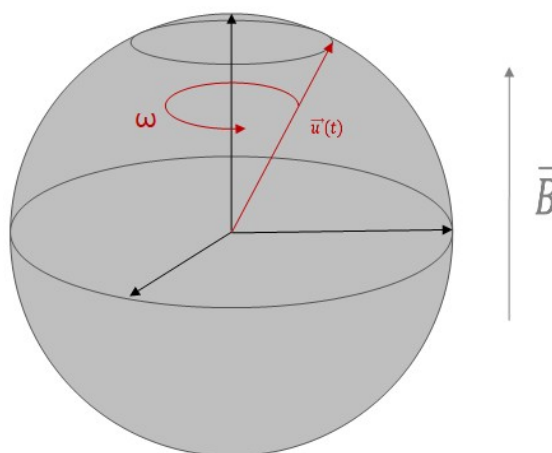
On obtient 2 équa diff :

$$\begin{cases} i \frac{da(t)}{dt} = \frac{\omega_0}{2} a \\ i \frac{db(t)}{dt} = -\frac{\omega_0}{2} b \end{cases}$$

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= a_0 |+\rangle_z + b_0 |-\rangle_z = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\phi}{2}} |+\rangle_z + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{+i\frac{\phi}{2}} |-\rangle_z \\ |\psi(t)\rangle &= \cos(\theta) e^{-i\left(\frac{\phi}{2} + \frac{\omega_0 t}{2}\right)} |+\rangle_z + \sin(\theta) e^{-i\left(\frac{\phi}{2} + \frac{\omega_0 t}{2}\right)} |-\rangle_z \\ &= |+\rangle_{\vec{u}}(t) \end{aligned}$$

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

#Slide



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

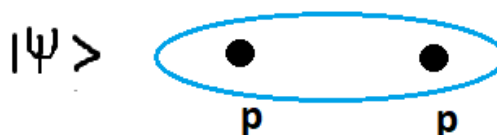
1) Etude général (statique) (~7 min)

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

Soit deux état non couplés :



L'état de 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 non diagonal: nous choisissons \hat{H}_1 antidiagonal.

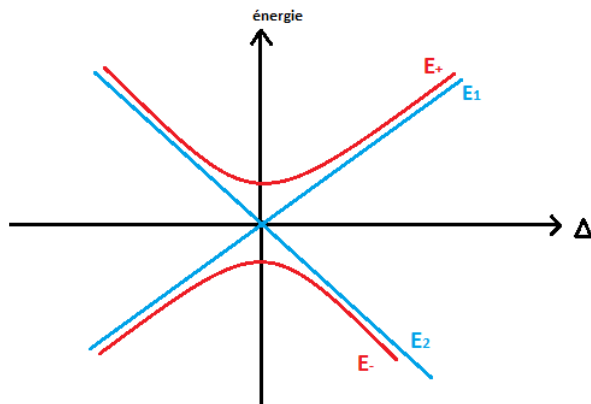
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} \\ w_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad w_{12} = w_{21}^*$$

\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 :

α $|E_+ - E_-| > |E_1 - E_2|$ le couplage éloigne les niveaux d'énergie entre eux

α l'effet de couplage est d'autant plus fort que $|\Delta|$ est petit.

α 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.

Initialement le système se trouve dans l'état $|\phi_1\rangle$ qui peut se décomposer dans la base :

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\phi_1\rangle = a_0|\Psi_1\rangle + b_0|\Psi_2\rangle$$

on peut réécrire a_0 et b_0 et :

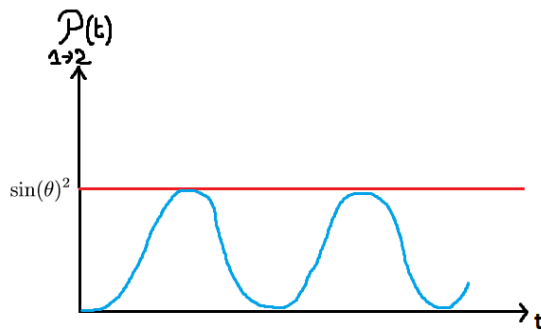
$$|\phi_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp i \frac{\phi}{2} |\psi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} \exp i \frac{\phi}{2} |\psi_2\rangle$$

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 opposé ϕ_2 n'est pas nul !

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



Oscillations de Rabi (dû au couplage)

Transition : cette oscillation permet de comprendre la RMN

III- Application : résonance magnétique nucléaire

1) Mise en œuvre (~6 min)

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 w de sorte à annuler cette aimantation.

$$\hat{H} = w_0 \hat{S}_z + w_1 (\cos(wt) \hat{S}_x + \sin(wt) \hat{S}_y)$$

$$\begin{aligned} w_0 &= B_0 \gamma \\ w_1 &= B_1 \gamma \\ w &= \text{freq}(B_1) \end{aligned}$$

En se plaçant dans le référentiel du champ tournant, on peut trouver un hamiltonien stationnaire de ce système : [#Slide](#)

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

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 :

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

Lorsque $w = w_0, \Delta w = 0$ et

$$P_{|+\rangle_z \rightarrow |-\rangle_z}(t) = \sin^2(w_1 t)$$

L'aimantation s'annule en moyenne.

Conclusion : !calculs qui permettent de comprendre la RMN.

Commentaires donnés 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 al 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 terme de matrice de Pauli ? Quelle est sa valeur en fonction du tps ?

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.)

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)

Bibliographie conseillée