Mécanique quantique

TD 5: Résonance magnétique nucléaire et systèmes à deux niveaux

1 Dynamique classique d'un spin dans un champ magnétique

L'objectif de ce paragraphe est de cerner la dynamique classique d'un moment placé dans un champ magnétique tournant. Cela permettra d'aborder par analogie la version quantique.

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. Afin de résoudre l'équation d'évolution du moment $\vec{\mu}(t)$, on se place dans un référentiel $\mathcal{R}'$ tournant à ω selon l'axe Oz. Soit $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y, \vec{e}_Z)$ une base orthonormée du référentiel $\mathcal{R}'$ superposée à la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ de $\mathcal{R}$ à $t = 0$. On pose $\omega_1 = -\gamma B_1$.

1. Justifier que la vitesse de $\vec{\mu}$ dans le référentiel $\mathcal{R}'$ vérifie

$$\left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}'} = \left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}} - \omega\vec{e}_Z \wedge \vec{\mu}(t). \tag{1}$$

2. En déduire 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.

3. Commenter le mouvement du moment dans le référentiel $\mathcal{R}'$ en fonction des valeurs de $\Delta\omega$ et ω_1. Tracer son évolution temporelle.

2 Dynamique quantique dans un champ tournant

4. 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. Donner l'expression du hamiltonien d'un moment dans un champ magnétique $\vec{B}$.

5. On s'intéresse à un champ magnétique composé d'un fort champ statique $B_0\vec{e}_z$ et d'un champ tournant selon le plan xOy noté $\vec{B}_1(t)$. Montrer que le hamiltonien peut s'écrire

$$H = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

$|\psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle$

6. Soit l'état quantique $|\phi\rangle = b_+(t)\,|+\rangle + b_-(t)\,|-\rangle$ où les coefficients sont définis à partir de ceux de $|\psi\rangle$: $b_\pm(t) = e^{\pm i\omega t/2}a_\pm(t)$. Écrire les équations vérifiées par les coefficients $b_\pm(t)$.

7. En déduire que cela revient à résoudre l'équation matricielle

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\phi\rangle}{\mathrm{d}t} = \tilde{H}\,|\phi\rangle \tag{3}$$

avec une matrice $\tilde{H}$ indépendante du temps que l'on exprimera.

On se ramène donc à résoudre une équation aux valeurs propres avec une matrice H qui a quatre coefficients non-nuls. C'est un problème plus général relatif à tous les systèmes à deux niveaux, qui mérite d'être étudié de façon systématique.

3 Systèmes quantiques à deux états

La représentation sous forme de matrice est extrêmement pratique, et se généralise facilement à tout système avec un nombre fini de degrés de liberté (à opposer à un nombre infini continu de degrés de liberté, par exemple si la particule est libre de se déplacer dans l'espace).[1]

Par exemple, on peut voir une molécule diatomique comme un système à deux niveaux d'énergie, où l'électron peut être dans l'état $|\phi_1\rangle$ d'énergie E_1 de l'atome de gauche, ou $|\phi_2\rangle$ d'énergie E_2 de l'atome de droite. Comme les atomes sont proches, le hamiltonien total du système possède des termes croisés ; $\left\langle \phi_2 \left| \hat{H} \right| \phi_1 \right\rangle = \left\langle \phi_1 \left| \hat{H} \right| \phi_2 \right\rangle^\star = W$.

8. Écrire le hamiltonien total du problème sous forme de matrice ; calculer ses énergies propres.

9. Tracer les valeurs propres en fonction de $\Delta = E_1 - E_2$. Superposer le graphe au cas où le terme de couplage est absent.

10. Le système est initialement dans l'état $|\phi_1\rangle$ lorsqu'on rapproche les atomes et qu'on branche le couplage. 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. On admettra que les vecteurs propres du système s'écrivent

$\sin^2\theta = \dfrac{4|w|^2}{4|w|^2+\Delta^2}$

$$\begin{cases} |\phi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |\phi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |\phi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |\phi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |\phi_2\rangle \end{cases} \tag{4}$$

11. À la vue de ces résultats, dans quelle circonstance parle-t-on de couplage fort ?

lorsqu'on peut passer facilement de 1 à 2 ($\Delta = 0$)

4 Retour sur la résonance magnétique nucléaire

On applique ici le résultat de la partie précédente à la résonance magnétique nucléaire.

12. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\tilde{H}$.

13. On suppose que $|\psi\rangle(t=0) = |+\rangle$. Montrer que $\mathcal{P}_{+-} = |\langle -|\phi\rangle|^2(t) = |\langle -|\psi\rangle|^2(t)$. En déduire l'expression de $\mathcal{P}_{+-}(t)$ en fonction de ω_1 et $\Delta\omega$.

14. Tracer et discuter ce résultat en fonction de $\Delta\omega$ et ω_1. Justifier la dénomination de « résonance » magnétique.

ω tournant $= \omega_0$ dans a

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.

TD n°5 | MQ

① Dynamique d'un spin ds 1 chp $\vec{B}$

1) Loi de composit° par changement de référentiel

$$\left.\frac{d\vec{v}}{dt}\right|_{R'} = \left.\frac{d\vec{v}}{dt}\right|_{R} - \Omega \wedge \vec{v}.$$

donc $\left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R'} = \left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R} - \omega\vec{e_z} \wedge \vec{\mu}(t)$

2) Dans le ref fixe : $\vec{B} = B_0 \vec{e_z} + \vec{B_1}$

TMC dans le ref tournant.

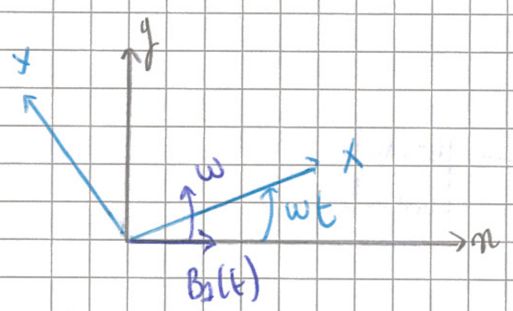
$$\left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R'} = \Sigma \mathcal{M}(\vec{F}) \text{ dans ref tournant}$$

$$= \left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R} - \omega\vec{e_z} \wedge \vec{\mu}(t)$$

$$= \Sigma \mathcal{M}(\vec{F})_{fixe} - \omega\vec{e_z} \wedge \vec{\mu}(t) = \gamma\left(\vec{\mu} \wedge \vec{B} - \vec{\omega} \wedge \vec{\mu}\right)$$

$$\left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R'} = \gamma\, \vec{\mu} \wedge \vec{B} - \vec{\omega} \wedge \vec{\mu}$$

$$\left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R'} = \vec{\mu} \wedge \left(\gamma \vec{B} + \vec{\omega}\right) = \gamma \vec{\mu} \wedge \left(\left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma}\right)\vec{u_z} + \vec{B_1}(t)\right)$$



$\vec{B_1}(t) = B_1 \vec{e_X}$ ↳ tourne ⇒ ∝ temps

donc $\vec{B_{eff}} = \left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma}\right)\vec{e_z} + B_1 \vec{e_X}$ statique

$\omega_0 = -\gamma B_0 \qquad \omega_1 = -\gamma B_1$

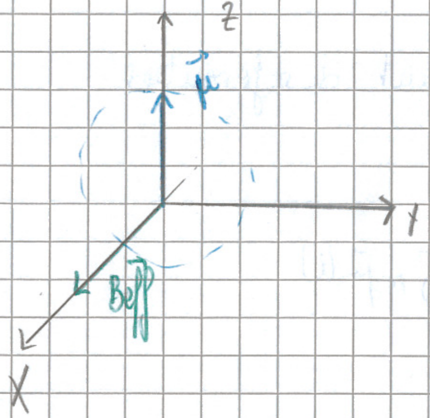
$$\vec{B_{eff}} = \left(-\frac{\omega_0}{\gamma} + \frac{\omega}{\gamma}\right)\vec{e_z} - \frac{\omega_1}{\gamma}\vec{e_X}$$

$$\Rightarrow \left.\frac{d\vec{\mu}}{dt}\right|_{R'} = \gamma\, \vec{\mu} \wedge \left[\frac{\Delta\omega}{\gamma}\vec{e_z} - \frac{\omega_1}{\gamma}\vec{e_X}\right]$$

OdG $B_0 \gg B_1$

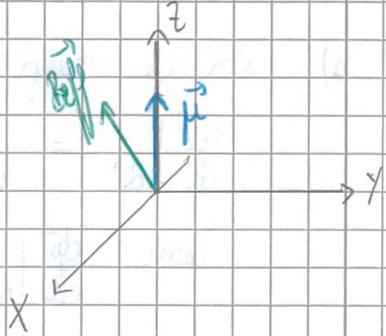
$5T \qquad 10^{-3}T$

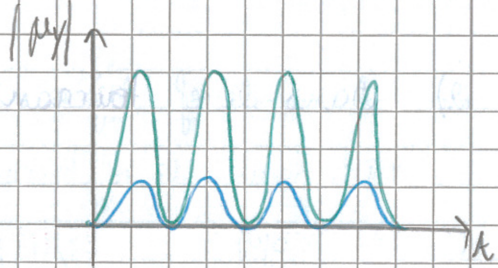
3) $\Delta\omega = \omega - \omega_0 = 0$



$\vec{\mu}$ cercle dans Y_0Z

$\Delta\omega \neq 0 \quad \Delta\omega \gg \omega_1$





2 Dynamique quantique dans un chp tournant

4) $S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$\hat{H} = -\vec{\mu}.\vec{B} = -g\gamma \vec{L}.\vec{B} = -g\gamma \vec{S}.\vec{B}$

5) $\vec{B} = B_0\vec{e_z} + \vec{B_1}(t)$

$\hat{H} = -g\gamma S_z B_0 \quad -g\gamma \vec{S}.\vec{B_1}(t) \longrightarrow \begin{vmatrix} \cos\omega t \\ \sin\omega t \\ 0 \end{vmatrix}$

$\hat{H} = -g\gamma\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} B_0 & 0 \\ 0 & -B_0 \end{pmatrix} - g\gamma\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \cos\omega t - i\sin\omega t \\ \cos\omega t + i\sin\omega t & 0 \end{pmatrix}$

$$\underline{\hat{H} = +g\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}}$$

6) $|\phi\rangle = b_+(t)\,|+\rangle + b_-(t)\,|-\rangle \qquad b_\pm(t) = e^{\pm i\omega t/2}\, a_\pm(t)$

TD n°5 | MQ

$E|\psi\rangle = H|\psi\rangle$

donc $\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a_+\omega_0 + a_-\omega_1 e^{-i\omega t} \\ a_+\omega_1 e^{i\omega t} - \omega_0 a_- \end{pmatrix}$

on veut voir si $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

$H|\phi\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} b_+\omega_0 + b_-\omega_1 e^{-i\omega t} \\ b_+\omega_1 e^{i\omega t} - \omega_0 b_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 e^{i\omega t/2} a_+ + \omega_1 e^{-i\omega t\frac{3}{2}} a_- \\ a_+\omega_1 e^{\frac{3}{2}i\omega t} - \omega_0 e^{-i\omega t/2} a_- \end{pmatrix}$

$\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cancel{e^{-i\omega t/2}}(\omega_0 b_+ + b_-\omega_1) \\ \cancel{e^{i\omega t/2}}(\omega_1 b_+ - \omega_0 b_-) \end{bmatrix} = E\begin{pmatrix} b_+ \cancel{e^{-i\omega t/2}} \\ b_- \cancel{e^{i\omega t/2}} \end{pmatrix}$

donc $\begin{cases} \frac{\hbar}{2}(\omega_0 b_+ + \omega_1 b_-) = E b_+ \\ \frac{\hbar}{2}(\omega_1 b_+ - \omega_0 b_-) = E b_- \end{cases}$

7) $i\hbar \frac{d|\phi\rangle}{dt} = \hat{H}|\phi\rangle$

$\hookrightarrow i\hbar\begin{pmatrix} \dot{b}_+ \\ \dot{b}_- \end{pmatrix} = \hat{H}\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}$

$i\hbar\begin{pmatrix} i\frac{\omega}{2} a_+ e^{+\dots} + e^{+\dots}\dot{a}_+ \\ -\frac{\omega}{2} a_- e^{-\dots} + e^{-\dots}\dot{a}_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{E}{2} b_+ + e^{i\omega t/2}\, i\hbar\dot{a}_+ \\ +\frac{E}{2} b_- + e^{-i\omega t/2}\, i\hbar\dot{a}_- \end{pmatrix}$

$H a_+$

$H a_-$

$= \begin{pmatrix} -\frac{\hbar E}{2} b_+ \\ \frac{E}{2} b_- \end{pmatrix} + H|\phi\rangle =$

On cherche $b_\pm(t)$

$$\frac{db_+}{dt} \longrightarrow \frac{da_+}{dt} \longrightarrow Ha_\pm \updownarrow b_\pm$$

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$$

$$i\hbar \frac{d|\phi\rangle}{dt} = \tilde{H}|\phi\rangle$$

$$i\hbar \frac{db_+}{dt} = i\hbar \frac{d}{dt}\left(e^{i\omega t/2} a_+\right) = i\hbar\, e^{\frac{i\omega t}{2}} \frac{da_+}{dt} - \frac{\hbar\omega}{2} b_+$$

or $i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_+ \\ \dot{a}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 a_+ + \omega_1 a_- e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} a_+ - \omega_0 a_- \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \dot{a}_+ = \frac{\hbar}{2}\omega_0 a_+ + \frac{\hbar\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_-$$

$$\text{d'où } i\hbar \dot{b}_+ = \frac{\hbar}{2}\omega_0 \underbrace{a_+ e^{\frac{i\omega t}{2}}}_{b_+} + \frac{\hbar\omega_1}{2} \underbrace{a_- e^{-i\omega t/2}}_{b_-} - \frac{\hbar\omega}{2} b_+$$

$$i\hbar \dot{b}_+ = \frac{\hbar\omega_0}{2} b_+ + \frac{\hbar\omega_1}{2} b_- - \frac{\hbar\omega}{2} b_+$$

idem pour b_-

$$\Rightarrow i\hbar \begin{pmatrix} \dot{b}_+ \\ \dot{b}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix}}_{\tilde{H}} \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}$$

3 Système quantique à 2 niveaux

Résolution schématique $|\phi\rangle \longrightarrow$ décomposit° sur les VP $\phi_\pm$ $\xrightarrow[\text{des coeffs}]{\text{évolut°}}$ $|\psi(t)\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \\ & E_2 \end{pmatrix}$$

$E_1 = \langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle = \langle H \rangle$

$\langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle \longrightarrow$ non nul $\Rightarrow \exists$ un couplage entre 1 et 2

$\langle \phi_2 | H | \phi_1 \rangle$

il faut de nouveau diagonaliser le hamiltonien pour avoir les VP.

8) $H = \begin{pmatrix} E_1 & W^* \\ W & E_2 \end{pmatrix}$

on calcule $\det(H - \lambda I) = \begin{vmatrix} E_1 - \lambda & W^* \\ W & E_2 - \lambda \end{vmatrix} = (E_1-\lambda)(E_2-\lambda) - |W|^2$

Utiliser : $\lambda^2 - \text{trace}(H)\lambda + \det(H) = 0$

$= E_1E_2 - E_1\lambda - \lambda E_2 + \lambda^2 - |W|^2 = 0$

$\Rightarrow \lambda^2 - (E_1+E_2)\lambda + E_1E_2 - |W|^2 = 0.$

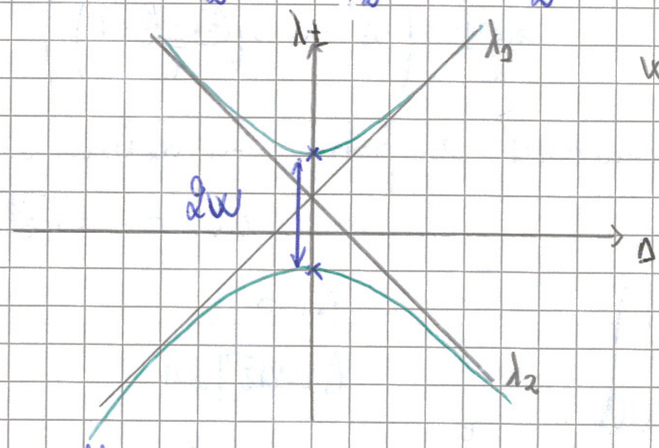
$\Delta = (E_1+E_2)^2 - 4(-|W|^2 + E_1E_2) = \underbrace{(E_1+E_2)^2 - 4E_1E_2}_{(E_1-E_2)^2} + 4|W|^2 \geq 0$

$\lambda_\pm = \dfrac{(E_1+E_2) \pm \sqrt{\Delta}}{2}$

9) $\lambda_\pm = \dfrac{E_1+E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\dfrac{E_1-E_2}{2}\right)^2 + 2|W|^2}$

$\Delta = E_1 - E_2$. si couplage nul

$\lambda_\pm = \dfrac{E_1+E_2}{2} \pm \dfrac{\Delta}{2} = \dfrac{E_1+E_2}{2} \pm \dfrac{E_1-E_2}{2} = E_1$ ou E_2



$W = 0$

qd $\Delta = 0$

L'effet du couplage est de lever la dégénérescence $\propto |W|$

TP → 2 bobines couplées : effet de la distance ⇒ levée de dég $\propto M$:

b) $EI = |\phi_1\rangle$

$P = |\langle\phi_2|\psi(t)\rangle|^2$

$|\psi(t)\rangle$? $\quad |\psi(t=0)\rangle = |\phi_1\rangle$

$\hookrightarrow |\psi(t)\rangle = e^{i\omega t}|\psi(t=0)\rangle = e^{i\omega t}|\phi_1\rangle$

$\cos\frac{\theta}{2}|\phi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\phi_-\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\phi_1\rangle + \sin^2\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\phi_1\rangle$

$\Rightarrow |\phi_1\rangle = e^{i\varphi/2}\left[\cos\frac{\theta}{2}|\phi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\phi_-\rangle\right]$

$\Rightarrow |\phi_2\rangle = e^{-i\varphi/2}\left[\sin\frac{\theta}{2}|\phi_+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|\phi_-\rangle\right]$

$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi/2}\left[\cos\frac{\theta}{2}e^{-iE_+t/\hbar}|\phi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{-iE_-t/\hbar}|\phi_-\rangle\right]$

$P = |\langle\phi_2|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-iE_+t/\hbar} - \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-iE_-t/\hbar}\right|^2$

$= \frac{\sin^2\theta}{4}\left(e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}\right)^2$

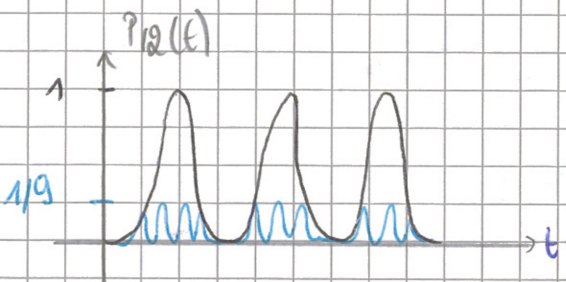
$= \frac{\sin^2\theta}{4}\left|1 - e^{-i(E_- - E_+)t/\hbar}\right|^2$

33^*

$= \frac{\sin^2\theta}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{E_+ - E_-}{\hbar}t\right)\right)$ Argument moitié

Pas $= 1$ à un moment la proba $\Rightarrow$ valeur max $= \sin^2\theta$.

$E_+ - E_- = \sqrt{\Delta^2 + 4|W|^2}$



$\Delta = 0$

$\Delta = 2\sqrt{2}|W|$

Passer d'1 état 1 à 2 $\Rightarrow$ dicté / Δ = désaccord (transfert d'E)