PHY361 - PC8
Résonance Magnétique Nucléaire

Voir dans le livre : Chapitre 8 & 12
Objectifs : Calcul explicite de la résonance magnétique nucléaire (calcul direct dans le domaine temporel et/ou diagonalisation dans le référentiel tournant).

Résumé de l'Amphi 8 et Rappels PC7

Mesure du spin selon un axe arbitraire

Dans un repère cartésien défini par les vecteurs unitaires $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$, l'observable de spin s'écrit :

$$\hat{\vec{S}} = \hat{S}_x\vec{e}_x + \hat{S}_y\vec{e}_y + \hat{S}_z\vec{e}_z$$

avec dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$:

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

Ainsi la projection du spin selon un axe arbitraire $\vec{u} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, est donnée par l'observable

$$\hat{S}_{\vec{u}} = \hat{\vec{S}}.\vec{u} = \hat{S}_x u_x + \hat{S}_y u_y + \hat{S}_z u_z = \hat{S}_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta\\ e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de $\hat{S}_{\vec{u}}$ sont $\pm\hbar/2$. Ainsi quelque soit l'axe $\vec{u}$ sur lequel on mesure le spin, on ne peut obtenir que $\pm\hbar/2$. Les états propres $|\pm\rangle_{\vec{u}}$ de $\hat{S}_{\vec{u}}$ sont :

$$\hat{S}_{\vec{u}}|\pm\rangle_{\vec{u}} = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_{\vec{u}} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} |+\rangle_{\vec{u}} & = e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + e^{+i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle_z \\ |-\rangle_{\vec{u}} & = -e^{-i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + e^{+i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle_z \end{cases}$$

Les valeurs moyennes de la mesure du spin selon les 3 axes x, y, z lorsque le système est dans l'état $|\pm\rangle_{\vec{u}}$ sont données par :

$$_{\vec{u}}\langle +|\hat{\vec{S}}|+\rangle_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2}\vec{u} \quad , \quad _{\vec{u}}\langle -|\hat{\vec{S}}|-\rangle_{\vec{u}} = -\frac{\hbar}{2}\vec{u}$$

Sphère de Bloch

Pour un état $|\psi\rangle$ d'un espace de Hilbert $\mathcal{E}$ quelconque de dimension deux, il existe toujours un axe unitaire

$$\vec{u} = \begin{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi\\ \sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta\end{pmatrix}$$

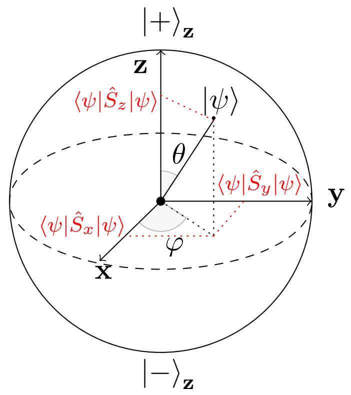
tel que :

$$|\psi\rangle = |+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle_z + e^{+i\frac{\varphi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle_z$$

les kets $|\pm\rangle_z$ étant les 2 états de la base de $\mathcal{E}$. On trouve l'axe unitaire $\vec{u}$ sachant que :

$$\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \langle\psi|\hat{\vec{S}}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle\psi|\hat{S}_x|\psi\rangle \\ \langle\psi|\hat{S}_y|\psi\rangle \\ \langle\psi|\hat{S}_z|\psi\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\vec{u}$$

L'état quantique $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$ est donc entiérement déterminé par la connaissance de $\vec{u}$. Par conséquent, on peut représenter cet état quantique par le vecteur $\vec{u}$ au sein d'une sphere unité qui par convention a son pole nord correspondant à l'état $|+\rangle_z$. Cette sphere est la sphere de Bloch.



Attention cette représentation peut être trompeuse : ainsi 2 états orthogonaux dans l'espace de Hilbert ne sont pas représentés par des vecteurs orthogonaux dans la sphère de Bloch mais par des vecteurs opposés.

Rotation du spin

La rotation de l'état de spin dans l'espace de Hilbert des spins est définie de telle sorte que les valeurs moyennes du spin $\langle\hat{\vec{S}}\rangle$ mesueées selon les 3 axes x, y, z subissent la rotation correspondante. Puisque $\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \frac{\hbar}{2}\vec{u}$, c'est donc $\vec{u}$ qui va subir la rotation correspondante. Ainsi, une rotation d'un angle α autour de l'axe z ne va modifier que l'angle φ de $\vec{u}$ via $\varphi \to \varphi + \alpha$. Cette opération est réalisée dans l'espace de Hilbert des états de spin par l'opérateur :

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{+i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \equiv e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{S}_z}$$

l'exponentiel d'un opérateur étant définie par son développement en série entière i.e.

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_n \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

Précession dans un champ statique

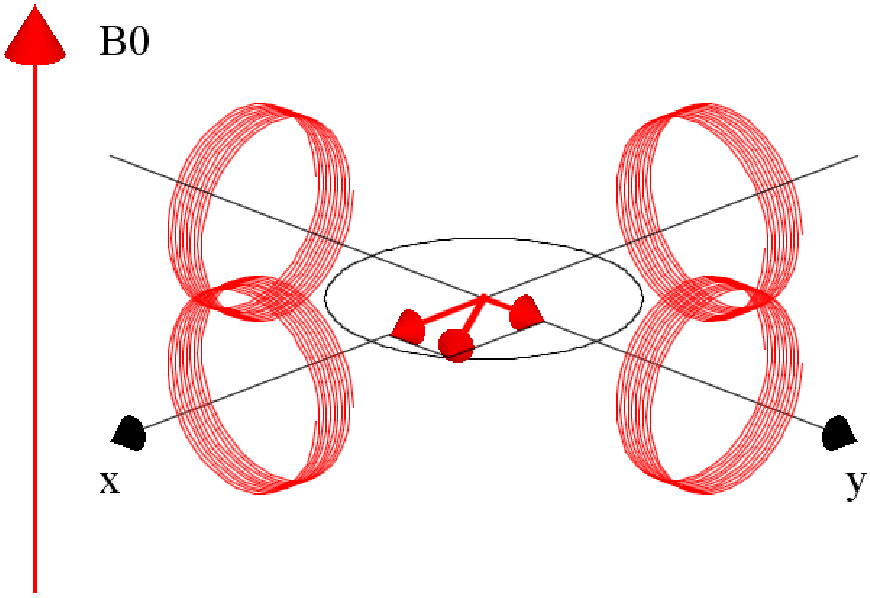
Un spin 1/2 plongé dans un champs magnétique uniforme $\vec{B}_0$ adopte un mouvement de précession autour de l'axe du champ magnétique :

$$\frac{d\,\langle\hat{\vec{S}}\rangle}{dt} = \omega_0 \frac{\vec{B}_0}{|\vec{B}_0|} \times \langle\hat{\vec{S}}\rangle$$

ou ω_0 est la pulsation de Larmor :

$$\omega_0 = -\gamma|\vec{B}_0|$$

avec γ, le rapport gyromagnétique reliant le moment magnétique au spin : $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$.



1 Résonance Magnétique Nucléaire

La RMN (Résonance Magnétique Nucléaire) est un phénomène de résonance qui se produit quand on place un spin dans un champ magnétique avec une partie constante et une partie oscillante à une fréquence particulière. Nous allons résoudre l'évolution temporelle de ce spin dans le cas général, puis étudier ce qui se passe à la résonance.
On considère une particule de spin 1/2 placée dans un champ magnétique fixe d'amplitude B_0 orienté selon l'axe z, auquel on superpose un champ magnétique tournant à la fréquence ω dans le plan xy, et d'amplitude B_1. On choisi l'origine des temps tel qu'en $t = 0$ le champ magnétique tournant est selon $\vec{x}$

1. Calculer la matrice de l'hamiltonien $\hat{H}(t)$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, définie comme la base propre de l'observable $\hat{S}_z$. On posera $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$, où γ est le rapport gyromagnétique.

L'hamiltonien s'écrit :
$$\hat{H}(t) = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(t) = -\gamma \hat{\vec{S}} \cdot (\vec{B}_0 + \vec{B}_1(t))$$
avec :
$$\vec{B}_1(t) = B_1(\cos(\omega t)\vec{x} + \sin(\omega t)\vec{y})$$
donc
$$\hat{H}(t) = -\gamma B_0 \hat{S}_z - \gamma B_1 \cos(\omega t)\hat{S}_x - \gamma B_1 \sin(\omega t)\hat{S}_y$$
soit :
$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_1}{2}\cos(\omega t)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_1}{2}\sin(\omega t)\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1(\cos(\omega t) - i\sin(\omega t)) \\ \omega_1(\cos(\omega t) + i\sin(\omega t)) & -\omega_0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$
Donc finalement :
$$\boxed{\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}}$$

---

2. On écrit l'état du système sous la forme
$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$$
Ecrire les équations différentielles dont sont solutions $a_+(t)$ et $a_-(t)$.

L'équation de Schrödinger s'écrit
$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
donc dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ on a :
$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix}$$
soit
$$\begin{aligned} \frac{da_+(t)}{dt} &= -\frac{i}{2}\left(\omega_0 a_+(t) + \omega_1 e^{-i\omega t} a_-(t)\right) \\ \frac{da_-(t)}{dt} &= -\frac{i}{2}\left(-\omega_0 a_-(t) + \omega_1 e^{i\omega t} a_+(t)\right) \end{aligned}$$

---

3. Afin de résoudre le système d'équations dépendant du temps ainsi obtenu, on se place dans un référentiel tournant à la fréquence ω. Ceci revient à introduire le ket
$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{R}_{-\omega t}|\psi(t)\rangle$$
ou $\hat{R}_\alpha$ est l'opérateur rotation introduit en cours. :
$$\hat{R}_\alpha = \exp\left[\frac{-i\alpha\hat{S}_z}{\hbar}\right]$$

   (a) Exprimer $\hat{R}_\alpha$ en fonction de $\hat{S}_z$ et $\hat{I}$ en effectuant le développement en série de l'exponentiel.

$$\hat{R}_\alpha = \exp\left[-\frac{i\alpha\hat{S}_z}{\hbar}\right] = \sum_n \frac{\left(-i(\alpha/\hbar)\hat{S}_z\right)^n}{n!}$$
avec :
$$\hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\hat{I}$$
donc :
$$\hat{S}_z^{2n} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2n}\hat{I} \;\; \& \;\; et : \hat{S}_z^{2n+1} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2n}\hat{S}_z$$
et :
$$\begin{aligned} \hat{R}_\alpha &= \sum_n \frac{\left(-i(\alpha/\hbar)\hat{S}_z\right)^n}{n!} \\ &= \left(\sum_n \left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2n}\frac{1}{(2n!)}\right)\hat{I} + \left(\sum_n \left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2n+1}\frac{1}{(2n+1)!)}\right)\frac{2}{\hbar}\hat{S}_z \\ &= \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{I} - i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\frac{2}{\hbar}\hat{S}_z \end{aligned}$$

(b) Ecrire $\hat{R}_\alpha$ sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$\hat{R}_\alpha = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{I} - i\frac{2}{\hbar}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{S}_z = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}$$

(c) $\hat{R}_\alpha$ est-il unitaire ? est-il hermitien ?

$$\hat{R}_\alpha^\dagger = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \neq \hat{R}_\alpha$$

Donc $\hat{R}_\alpha$ n'est pas hermitien, mais par contre :

$$\hat{R}_\alpha^\dagger\hat{R}_\alpha = \hat{R}_\alpha\hat{R}_\alpha^\dagger = \hat{I}$$

donc $\hat{R}_\alpha$ est unitaire. Un opérateur unitaire ne décrit pas une quantité physique mesurables, mais ils sont essentiels en mécanique quantique car associés à des opérations de symmétrie et aux quantités conservées d'un problème.

(d) Quel est l'action de $\hat{R}_\alpha$ sur un vecteur unitaire quelconque (ϕ, θ) :

$$|+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\phi/2}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle + e^{i\phi/2}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle$$

$$\begin{aligned}\hat{R}_\alpha|+\rangle_{\vec{u}} &= e^{-i\phi/2}e^{-i\alpha/2}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle_z + e^{i\phi/2}e^{i\alpha/2}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle_z \\ &= e^{-i(\phi+\alpha)/2}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle_z + e^{i(\phi+\alpha)/2}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle_z \\ &= |+\rangle_{\vec{u'}}\end{aligned}$$

avec $\vec{u'}$ de direction $(\phi+\alpha, \theta)$, ce qui correspond dans la sphère de Bloch à une rotation d'angle α autour de z

4. On a défini :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{R}_{-\omega t}|\psi(t)\rangle$$

On pose dans la base$\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$$

Exprimer $b_\pm(t)$ en fonction de $a_\pm(t)$.

On a

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \begin{pmatrix} b_+(t) \\ b_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2}a_+(t) \\ e^{-i\omega t/2}a_-(t) \end{pmatrix}$$

soit

$$\boxed{b_+(t) = \exp(i\omega t/2)a_+(t)}$$

$$\boxed{b_-(t) = \exp(-i\omega t/2)a_-(t)}$$

5. Etablir le système d'équations vérifié par $b_+(t)$ et $b_-(t)$, et interpréter le résultat obtenu.

On a pour $b_+(t)$:

$$\begin{aligned}
\frac{db_+(t)}{dt} &= \frac{d}{dt}\left(\exp(i\omega t/2)a_+(t)\right) \\
&= \exp(i\omega t/2)\left(i\frac{\omega}{2}a_+(t) + \frac{da_+(t)}{dt}\right) \\
&= \exp(i\omega t/2)\left(i\frac{\omega}{2}a_+(t) - \frac{i}{2}\left(\omega_0 a_+(t) + \omega_1 e^{-i\omega t}a_-(t)\right)\right) \\
&= i\frac{\omega}{2}b_+(t) - i\frac{\omega_0}{2}b_+(t) - i\frac{\omega_1}{2}b_-(t) \\
&= i\frac{\omega - \omega_0}{2}b_+(t) - i\frac{\omega_1}{2}b_-(t)
\end{aligned}$$

De même pour $b_-(t)$:

$$\frac{db_-(t)}{dt} = -i\frac{\omega - \omega_0}{2}b_-(t) - i\frac{\omega_1}{2}b_+(t)$$

On obtient donc le système d'équations linéaires :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}$$

On peut interpréter ce résultat en le comparant à l'équation de Schrödinger dans le référentiel fixe dont nous étions partis :

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

D'une part, on constate que la dépendance en temps du terme non diagonal a bien été éliminée, ce qui était précisément l'objectif poursuivi en se plaçant dans le référentiel tournant, dans lequel le champ magnétique tournant devient fixe.
D'autre part, dans les éléments diagonaux de l'hamiltonien, ω_0 est remplacé par $(\omega_0 - \omega)$. En l'absence de champ tournant ($\Rightarrow \omega_1 = 0$), on aura donc une précession de Larmor (CF PC7) à la fréquence $\omega_0 - \omega$ plutôt que ω_0 dans le référentiel fixe. Là encore, il s'agit d'une conséquence directe du changement de référentiel : en combinant la précession de Larmor à la fréquence $\omega_0 - \omega$ dans le référentiel tournant avec la rotation du référentiel à la fréquence ω, on retrouve bien une précession de Larmor à la fréquence ω_0 dans le référentiel fixe.

6. Calculer les derivées secondes en temps de $b_+(t)$ et $b_-(t)$ et en déduire une équation différentielle du second ordre dont elles sont solution. On introduira la fréquence de Rabi :

$$\Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}$$

En dérivant une seconde fois par rapport au temps, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2}b_+(t) &= i\frac{\omega-\omega_0}{2}\frac{d}{dt}b_+(t) - i\frac{\omega_1}{2}\frac{d}{dt}b_-(t) \\
&= i\frac{\omega-\omega_0}{2}\left(i\frac{\omega-\omega_0}{2}b_+(t) - i\frac{\omega_1}{2}b_-(t)\right) - i\frac{\omega_1}{2}\left(-i\frac{\omega-\omega_0}{2}b_-(t) - i\frac{\omega_1}{2}b_+(t)\right) \\
&= -\left(\frac{\omega-\omega_0}{2}\right)^2 b_+(t) \underbrace{-\frac{\omega_0-\omega}{2}\frac{\omega_1}{2}b_-(t) + \frac{\omega_1}{2}\frac{\omega_0-\omega}{2}b_-(t)}_{=0} - \left(\frac{\omega_1}{2}\right)^2 b_+(t) \\
&= -\left(\left(\frac{\omega-\omega_0}{2}\right)^2 + \left(\frac{\omega_1}{2}\right)^2\right) b_+(t) \\
&= -\frac{\Omega^2}{4}b_+(t)
\end{aligned}$$

De même pour $b_-(t)$:

$$\frac{d^2}{dt^2}b_-(t) = -\frac{\Omega^2}{4}b_-(t)$$

7. Exprimer la solution générale de l'équation obtenue en fonction de $b_+(0)$ et $b_-(0)$.

La solution générale de cette équation différentielle du second ordre s'écrit

$$b_+(t) = A_+\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + B_+\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

les constantes A_+ et B_+ pouvant être déterminées à l'aide des conditions initiales. Ainsi $b_+(0) = A_+$ (et $b_-(0) = A_-$). Pour B_+ et B_- nous avons :

$$B_+ = \frac{2}{\Omega}\frac{d}{dt}b_+(t=0) = \frac{2}{\Omega}\left(-i\frac{\omega-\omega_0}{2}b_+(0) - i\frac{\omega_1}{2}b_-(0)\right) = -i\frac{\omega_0-\omega}{\Omega}b_+(0) - i\frac{\omega_1}{\Omega}b_-(0)$$

$$B_- = \frac{2}{\Omega}\frac{d}{dt}b_-(t=0) = \frac{2}{\Omega}\left(i\frac{\omega-\omega_0}{2}b_-(0) - i\frac{\omega_1}{2}b_+(0)\right) = i\frac{\omega_0-\omega}{\Omega}b_-(0) - i\frac{\omega_1}{\Omega}b_+(0)$$

ce qui nous permet finalement d'écrire

$$\begin{aligned}
b_+(t) &= b_+(0)\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \left(-i\frac{\omega_0-\omega}{\Omega}b_+(0) - i\frac{\omega_1}{\Omega}b_-(0)\right)\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \\
b_-(t) &= b_-(0)\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \left(i\frac{\omega_0-\omega}{\Omega}b_-(0) - i\frac{\omega_1}{\Omega}b_+(0)\right)\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)
\end{aligned}$$

8. On considère dorénavant la condition initiale

$$|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle$$

Donner dans ce cas l'expression de $b_+(t)$ et $b_-(t)$.

La condition initiale s'exprime dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$\begin{pmatrix} b_+(0) \\ b_-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

donc $b_+(0) = 1$ et $b_-(0) = 0$. On obtient alors :

$$b_+(t) = \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\omega_0 - \omega}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$
$$b_-(t) = -i\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

9. Établir et commenter l'expression de la probabilité de trouver le spin dans l'état $|-\rangle$. Que se passe-t-il à la résonance ?($\omega = \omega_0$).

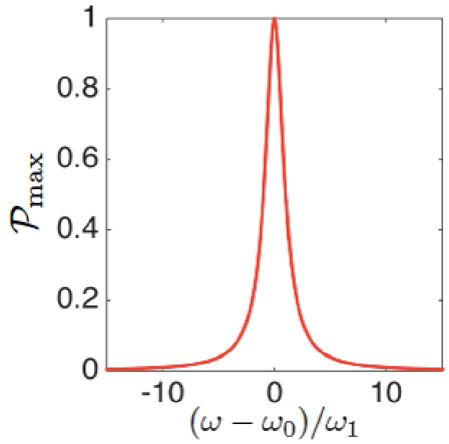
On a

$$\mathcal{P}_-(t) = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |b_-(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{1}{2}\frac{\omega_1^2}{\Omega^2}(1 - \cos(\Omega t))$$

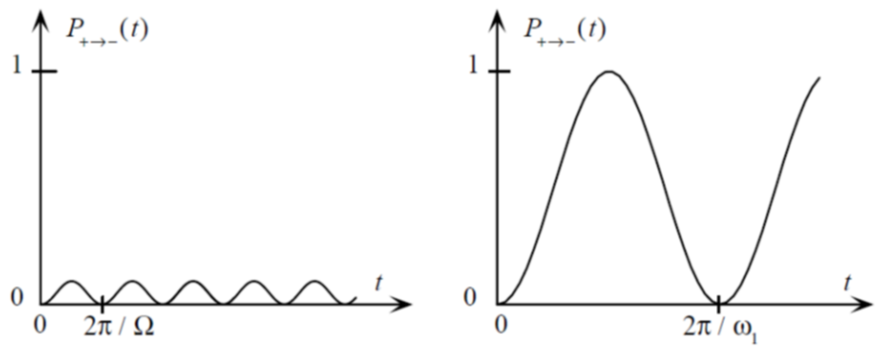
On obtient donc une évolution sinusoïdale, de fréquence Ω (et non $\Omega/2$!) que l'on appel oscillation de Rabi. L'amplitude de l'oscillation est égale à

$$\frac{\omega_1^2}{\Omega^2} = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}$$

c'est à dire une fonction lorentzienne centrée sur $\omega = \omega_0$ et de largeur à mi-hauteur $2\omega_1$. La valeur maximale de cette lorentzienne est égale à 1 quelle que soit la valeur de ω_1.



A la résonance, on a $\omega = \omega_0$ et $\Omega = \omega_1$. On en déduit



$$b_+(t) = \cos\frac{\omega_1 t}{2} \quad\Rightarrow\quad \mathcal{P}_+(t) = \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$
$$b_-(t) = -i\sin\frac{\omega_1 t}{2} \quad\Rightarrow\quad \mathcal{P}_-(t) = \cos^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

A la résonance on oscille entre les deux états avec des probabilités allant de 0 a 1 :

10. (Facultatif) En partant des résultats de la question 5 :
    (a) Déterminer les états propres ($|\tilde{+}\rangle, |\tilde{-}\rangle$) et énergies propres de l'hamiltonien dans le référentiel tournant (base $\{\hat{R}_{-\omega t}|+\rangle, \hat{R}_{-\omega t}|-\rangle\}$).

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix}$$

donc les énergies propres sont solution du polynôme caractéristique :

$$\lambda^2 - \left(\frac{\hbar\Omega}{2}\right)^2$$

Donc

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar\Omega}{2}$$

En introduisant :

$$\cos(\alpha) = \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} \;\;\&\;\; \sin(\alpha) = \frac{\omega_1}{\Omega}$$

$\hat{H}$ s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\Omega}{2}\begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & -\cos(\alpha) \end{pmatrix}$$

le vecteurs propres (a_+, b_+) est solution de

$$\begin{cases} \cos(\alpha)a_+ \sin(\alpha)b_+ = a_+ \\ \sin(\alpha)a_+ - \cos(\alpha)b_+ = b_+ \end{cases}$$

et on a :

$$|\tilde{+}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} \;\;\&\;\; |\tilde{-}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\frac{\alpha}{2}) \\ \cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}$$

    (b) Résoudre l'équation de Schrödinger en décomposant sur ces états propres ($|\tilde{+}\rangle, |\tilde{-}\rangle$) en prenant la même condition initiale $|+\rangle$.

Sur la base tournante, $\hat{H}$ ne dépend pas du temps donc on a simplement :

$$|\psi\rangle = Ae^{-iE_+t/\hbar}|\tilde{+}\rangle + Be^{-iE_-t/\hbar}|\tilde{-}\rangle$$

avec comme condition initiale :

$$|\psi(t=0)\rangle = A|\tilde{+}\rangle + B|\tilde{-}\rangle = |+\rangle = \hat{R}_{-\omega t}|+\rangle_{t=0}$$

donc

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\begin{pmatrix} -\sin(\frac{\alpha}{2}) \\ \cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}$$

donc on a :

$$|\psi\rangle = e^{-i\Omega t/2}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\tilde{+}\rangle - e^{i\Omega t/2}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\tilde{-}\rangle$$

(c) Exprimer les solutions dans la base fixe $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

On exprime $|\tilde{+}\rangle$ et $|\tilde{-}\rangle$ dans la base fixe :

$$|\tilde{+}\rangle = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{i\omega t}|+\rangle + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-i\omega t}|-\rangle$$

$$|\tilde{-}\rangle = -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{i\omega t}|+\rangle + \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-i\omega t}|-\rangle$$

On obtient finalement :

$$|\psi\rangle = \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right)|+\rangle - i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)|-\rangle$$

et en remplaçant les $\cos(\alpha/2)$ par leur valeur :

$$|\psi\rangle = \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\omega_0 - \omega}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right)|+\rangle - i\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)|-\rangle$$

Ce qui est bien la même chose que pour la question 8.