jean-damien.pillet@polytechnique.edu

Rappels de PC7 : le spin 1/2

1. L'observable "spin" est un moment cinétique intrinsèque dont la mesure le long d'une direction d'espace ne peut donner que deux valeurs : $+\frac{\hbar}{2}$ ou $-\frac{\hbar}{2}$. Dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ des états propres de la composante $\hat{S}_z$ du spin suivant l'axe z, les trois composantes du spin s'écrivent :
$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{1}$$

2. Les relations de commutations de ces opérateurs sont données par :
$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\hat{S}_z, \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hbar\hat{S}_y, \quad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = i\hbar\hat{S}_x. \tag{2}$$
En termes physiques, elles signifient qu'il n'est pas possible de connaitre simutanément les différentes composantes d'un spin.

3. Dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$, l'observable associée à la mesure d'un spin dans la direction $\vec{u} = \sin\theta\,(\cos\varphi\vec{u}_x + \sin\varphi\vec{u}_y) + \cos\theta\vec{u}_z$, peut s'écrire sous la forme :
$$\hat{\vec{S}}\cdot\vec{u} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta\\ e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}$$
avec $\varphi \in [0, 2\pi[$ et $\theta \in [0, \pi]$ et $\hat{\vec{S}} = \hat{S}_x\vec{u}_x + \hat{S}_x\vec{u}_y + \hat{S}_z\vec{u}_z$. Elle a pour valeurs propres $\pm\hbar/2$ avec les états propres associés
$$|+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\varphi/2}\cos\tfrac{\theta}{2}|+\rangle_z + e^{i\varphi/2}\sin\tfrac{\theta}{2}|-\rangle_z$$
et
$$|-\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\varphi/2}\sin\tfrac{\theta}{2}|+\rangle_z - e^{i\varphi/2}\cos\tfrac{\theta}{2}|-\rangle_z$$
Ces états correspondent à des spins pointant respectivement dans la direction $\vec{u}$ ou $-\vec{u}$. Ils peuvent aussi s'écrire sous la forme de vecteurs colonne :
$$|+\rangle_{\vec{u}} = \begin{pmatrix}e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \quad |-\rangle_{\vec{u}} = \begin{pmatrix}e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2}\\ -e^{i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$
[Rem : Ne pas oublier que lorsque l'on représente un opérateur ou un état sous une forme matricielle ou un vecteur colonne, cela signifie implicitement que l'on a fait un choix de base. Ici il s'agit bien évidemment de $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$.]

4. En choisissant les angles de sorte que $\theta = \varphi = 0$, on retrouve l'observable $\hat{S}_z$ ainsi que les état $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$. On peut faire de même pour les observable $\hat{S}_x$ et $\hat{S}_y$.

5. Il est possible de représenter géométriquement un tel état par un point sur une sphère de Bloch de rayon de $\hbar/2$ dont la position est donnée par le vecteur $\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \frac{\hbar}{2}\vec{u}$.

6. En présence d'un champ magnétique $B_0\vec{u}_z$, ce vecteur précesse autour de l'axe z. L'angle θ reste constant mais φ devient une fonction du temps $\varphi(t) = \varphi(0) + \omega_0 t$.

1 La résonance magnétique (chapitre 12 du livre)

La résonance magnétique est un phénomène physique dont les applications sont nombreuses en physique, chimie, biologie ou médecine. Elle se produit lorsque l'on place un (ou plusieurs) spin dans un champ magnétique avec une composante verticale constante $\vec{B}_0 = B_0\,\vec{u}_z$ et une composante horizontale oscillante $\vec{B}_1(t) = B_1\,(\cos(\omega t)\vec{u}_x + sin(\omega t)\vec{u}_y)$.

1. Quel est l'hamiltonien $\hat{H}$ d'un spin 1/2 dans le champ magnétique $\vec{B}_0 + \vec{B}_1$? On pourra introduire les fréquences $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$.

2. On définit les opérateurs $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$. Comment s'écrivent-ils sous forme matricielle dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$? Commenter leur action sur les états $|\pm\rangle_z$?

3. Réécrire $\hat{H}$ au moyen de ces opérateurs et commenter le rôle des différents termes.

4. Pouvons nous calculer l'évolution temporelle d'un état $|\sigma(t)\rangle$ en le décomposant sur l'ensemble des états propres de $\hat{H}$?

5. Pour s'affranchir de la dépendance temporelle de $\hat{H}$, on effectue la transformation :

$$|\tilde{\sigma}(t)\rangle = e^{i\omega t\hat{S}_z/\hbar}|\sigma(t)\rangle \tag{3}$$

   Montrer qu'elle correspond à une rotation d'angle $-\omega t$ autour de l'axe z. On dit alors que l'on se place dans le référentiel tournant à la fréquence ω.

   [Astuce : on utilisera l'expression d'un état de spin d'orientation arbitraire dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ vu en PC7.]

6. Montrer que, dans ce référentiel tournant, $|\tilde{\sigma}(t)\rangle$ vérifie l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{d|\tilde{\sigma}(t)\rangle}{dt} = \hat{H}_{\text{eff}}|\tilde{\sigma}(t)\rangle \tag{4}$$

   où $\hat{H}_{\text{eff}}$ est un hamiltonien effectif ne dépendant pas du temps.

7. Déterminer les énergies propres et vecteurs propres de $\hat{H}_{\text{eff}}$.

8. Le système est préparé dans l'état $|+\rangle_z$ à $t = 0$. Déterminer $|\tilde{\sigma}(t)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ en le décomposant sur les états propres de $\hat{H}_{\text{eff}}$.

   [Rem : On pourrait aussi poser $|\tilde{\sigma}(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle_z + b_-(t)|-\rangle_z$ et résoudre directement l'équation de Schrödinger (chapitre 12 du livre).]

9. Calculer la probabilité $\mathcal{P}_{+\to-}(t)$ de trouver le système dans l'état $|-\rangle_z$ en fonction du temps. Tracer cette évolution, aussi appelée oscillations de Rabi, pour $\omega \approx \omega_0$ et pour $|(\omega - \omega_0)| \gg \omega_1$. Pourquoi parle-t-on de résonance magnétique ?