

LP.43 Evolution temporelle d'un système quantique à deux niveaux

Maria Ubero Gonzalez

Table des matières

1	Etude de la molécule d'ammoniac	4
1.1	Position du problème	4
1.2	Puits non couplés	4
1.3	Puits couplés	6
1.4	Evolution temporelle : phénomène d'inversion	7
2	Application. Le Maser à ammoniac	8
2.1	Le couplage de NH_3 à un champ électrique	8
2.2	Séparation des états	9
2.3	Champ oscillant et effet maser	11
3	Résonance magnétique	13
3.1	Position du problème	13
3.2	Oscillations de Rabi	15
3.3	Applications	16

Rapport du jury

La leçon s'appelait jusqu'en 2013 : "Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique : modes propres. Systèmes à deux niveaux d'énergie en mécanique quantique.

La leçon s'appelait jusqu'en 2014 : "Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique et en mécanique quantique.

Ce qui veut dire : avoir en tête les analogies entre le système à deux niveaux en mécanique et en quantique ainsi que les différences. Connaître des exemples.

2017. Il est intéressant que les candidats s'appuient sur un exemple de système quantique à deux niveaux d'énergie pour construire cette leçon.

2015. Il est étonnant de voir cette leçon s'appuyer sur les états stationnaires sans aucun élément de justification. L'évolution d'un système quantique en régime forcé est trop souvent totalement négligée.

Bibliographie :

- Jean-Louis Basdevant & Jean Dalibard. Mécanique quantique.
- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë. Mécanique quantique, tome I.

Pré-requis :

- Puits de potentiel infini et barrière de potentiel, effet tunnel.
- Expérience de Stern et Gerlach.
- Matrices de Pauli.
- Equation de Schrödinger, opérateurs quantiques.
- Facteur gyromagnétique, fréquence de Larmor, précession.

Objectif. Importance des états propres, résonance et applications grâce à une meilleure compréhension de la mécanique quantique.

Introduction

L'expérience de **Stern et Gerlach** a été mise au point par Otto Stern et Walther Gerlach en février 1922. Elle consiste à envoyer un jet d'atomes d'argent dans un champ magnétique non uniforme de direction z orthogonale à la vitesse initiale des atomes. On mesure la déviation éventuelle des atomes par ce gradient de champ magnétique en regardant l'impact des atomes sur un écran orthogonal à la direction initiale du jet atomique.

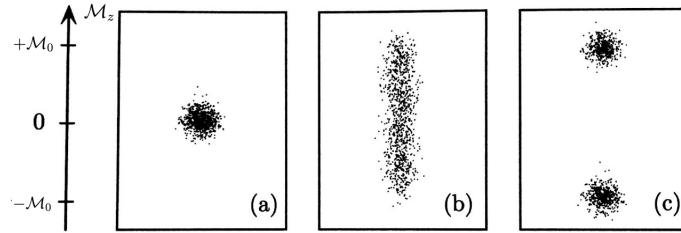
Animation. <http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/stern.html>

Selon la mécanique classique, les atomes doivent ressentir une force de la forme :

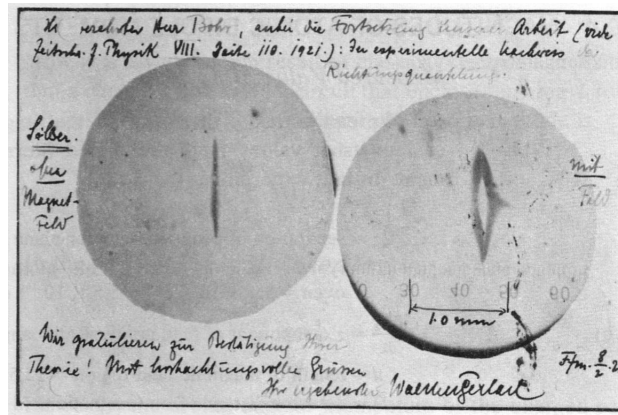
$$F_z = \mathcal{M}_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (1)$$

En supposant que les atomes portent un moment magnétique de norme \mathcal{M}_0 et que ces moments ont une direction aléatoire quand ils entrent dans la zone de champ magnétique, on s'attend à ce que les points d'impact sur l'écran forment un segment parallèle à z . Les deux extrémités du segment correspondent aux atomes dont les moments magnétiques sont orientés tels que $\mathcal{M}_z = \pm \mathcal{M}_0$.

Par contre, le résultat trouvé expérimentalement diffère de cette prédiction classique. L'ensemble des impacts dans le cas de l'argent forment deux taches correspondant à $\mathcal{M}_z = \pm \mathcal{M}_0$ avec $\mathcal{M}_0 = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$. On explique ce phénomène en introduisant une observable de nature essentiellement quantique : le moment cinétique de spin, ou plus simplement spin. Le spin est comparable à un moment cinétique intrinsèque, mais l'analogie classique est très limitée.



Images : (a) en absence de gradient magnétique, (b) simulation du résultat attendu classiquement, (c) simulation du résultat trouvé lors de l'expérience.



Dans le cas de l'atome d'argent, la séparation en deux faisceaux révèle qu'il existe deux états possibles pour le spin de l'atome. L'étude des opérateurs de spin comme opérateurs de moment cinétique permet d'aboutir à la valeur $1/2$ (en unité de \hbar) pour le spin total, auquel correspondent les deux états (projections) possibles : $+1/2$ et $-1/2$. Ces deux états amènent à deux niveaux d'énergie comme nous verrons dans cette leçon ce qui explique le terme de **système quantique à deux niveaux**.

Nous nous proposons dans cette leçon d'exploiter la formulation matricielle de la mécanique quantique en considérant le cas d'un système physique qui se décrit dans l'espace de Hilbert le plus

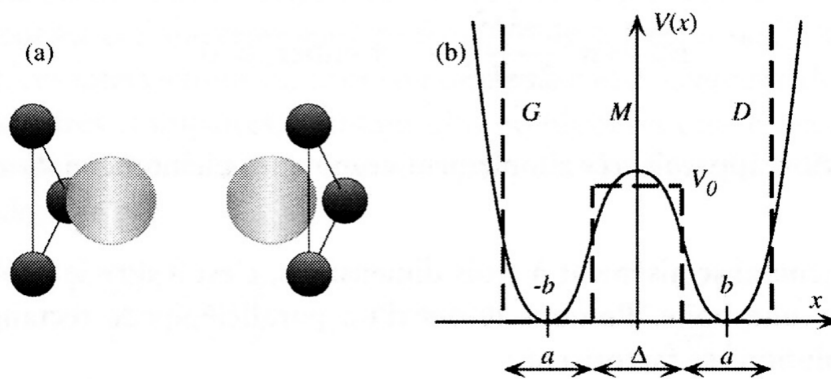
simple : un espace à deux dimensions. Les vecteurs d'un espace à deux dimensions sont combinaisons linéaires de deux vecteurs de base, et on appelle ces systèmes des **systèmes à deux états**.

Nous étudierons dans un premier temps la molécule d'ammoniac ce qui nous permettra d'expliquer dans un deuxième temps le principe de fonctionnement du maser à ammoniac. Nous finirons par expliquer le phénomène de résonance magnétique ainsi que ses applications.

1 Etude de la molécule d'ammoniac

1.1 Position du problème

Dans la molécule d'ammoniac NH_3 , les trois atomes d'hydrogène forment la base d'une pyramide dont l'azote occupe le sommet. Soit P le plan des trois atomes d'hydrogène, D la perpendiculaire à P passant par l'atome d'azote et, sur D , x l'abscisse de P par rapport à l'azote pris comme origine. Supposons que la molécule reste toujours pyramidale, que l'azote reste fixe. L'allure de l'énergie potentielle $V(x)$ en fonction de x est la suivante :



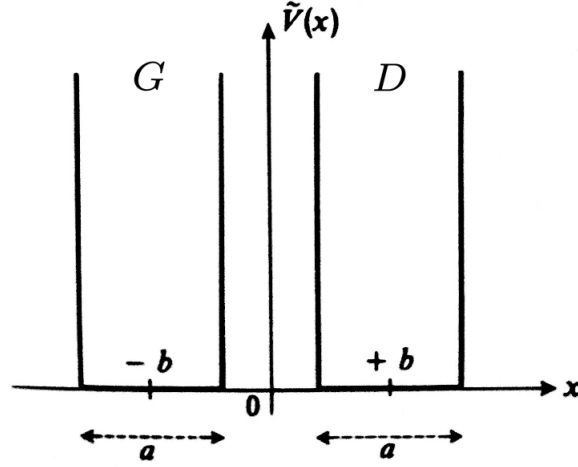
Explication qualitative : pour la position d'équilibre $x = b$, $V(x)$ passe par un minimum. Si nous obligeons x à diminuer, l'énergie croît, passe par un maximum pour $x = 0$, état instable pour lequel les quatre atomes sont dans le même plan. Si x devient négatif, nous avons retourné la molécule comme un parapluie. Nous voyons qu'il existe un autre minimum pour $x = -b$ et l'énergie $v(x)$ est symétrique par rapport à l'origine : $V(x) = V(-x)$.

Valeur de $b = 0.4 \text{ \AA}$ et $V_0 = 0,25 \text{ eV}$.

1.2 Puits non couplés

Faire vite et la plupart sur diapos car c'est un prérequis.

On suppose dans un premier temps que la barrière de potentiel V_0 est infinie (auquel cas il n'y a pas d'effet tunnel possible). Ceci nous permettra de mieux comprendre ensuite les conséquences de l'effet tunnel à travers la barrière de potentiel finie. On considère une particule soumise à un potentiel $\tilde{V}(x)$ constitué de deux puits de largeur a et centrés sur $x = \pm b$. Si la particule est dans l'un de ces puits, elle ne peut pas passer dans l'autre.



On obtient :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (2)$$

où n est un nombre entier positif et $m = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N}$ est la masse réduite du système.

$$\psi_D^n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[k_n \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right] & \text{si } b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2} \\ 0 & \text{partout ailleurs.} \end{cases} \quad (3)$$

$$\psi_G^n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[k_n \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right] & \text{si } b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2} \\ 0 & \text{partout ailleurs.} \end{cases} \quad (4)$$

Dans l'état $|\psi_G\rangle$, la particule se trouve dans le puits infini de gauche ; dans l'état $|\psi_D\rangle$ elle est dans celui de droite.

Dorénavant nous nous limiterons à l'étude du niveau fondamental car les niveaux d'énergie supérieurs sont très écartés de ce niveau. Par conséquent, la probabilité de trouver la molécule dans un état d'énergie supérieure est très faible. [Justification claire pag 136 X, avec le rapport de populations.](#)

Dans la base $|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle$ l'opérateur hamiltonien \hat{H}_0 est diagonal :

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

car les états $|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle$ ont la même énergie. Cela implique une dégénérescence. La molécule restera dans la configuration où elle était en $t = 0$ ce qui l'empêche de se retourner.

Transition. Pour pouvoir expliquer l'inversion de la molécule d'ammoniac, il faut prendre en compte que la barrière de potentiel n'est pas infinie mais finie, ce qui implique un couplage entre les deux puits.

1.3 Puits couplés

On se place dans le cas où $E \ll V_0$. Dans ce cas, le niveau d'énergie fondamental E'_0 sera inférieur au niveau fondamental E_0 du puits simple car la particule peut explorer plus d'espace ce qui donne un puits effectif plus large. **X pag 97.**

Pour tenir compte du fait que la barrière n'est pas infinie, ajoutons à \hat{H}_0 une perturbation W non diagonale dans la base $|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle$ et représentée par la matrice :

$$W = -A \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

où A est un coefficient réel et positif. L'opérateur hamiltonien total $\hat{H} = \hat{H}'_0 + W$ s'écrit alors :

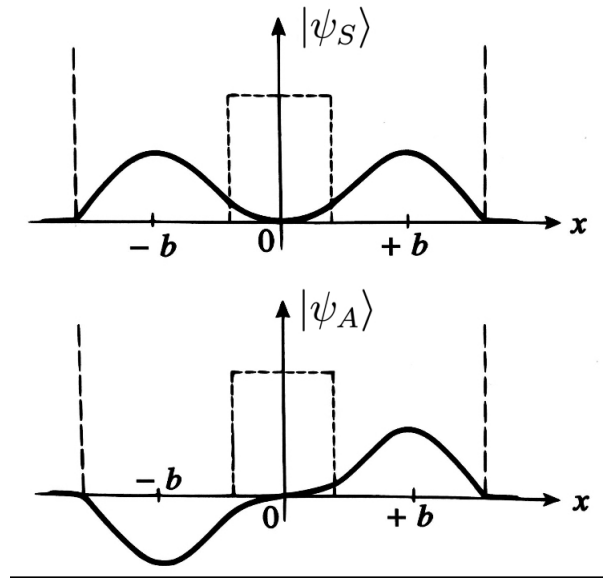
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E'_0 & -A \\ -A & E'_0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Les termes non diagonaux dans l'hamiltonien sont appelés *termes de transition*. Ce sont ces termes qui induisent les transitions périodiques des états $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ l'un vers l'autre : plus A est grand, plus cette transition est rapide.

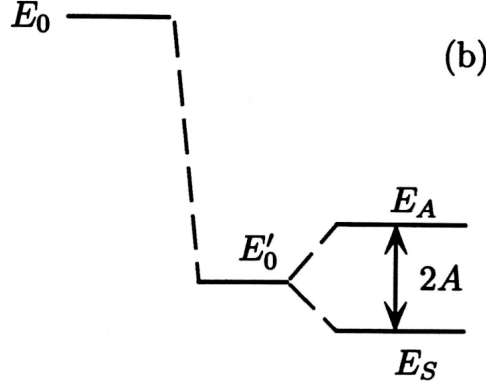
On peut diagonaliser cette matrice afin de trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de \hat{H} . On trouve :

$$\text{Valeurs propres} = \begin{cases} E_A = E'_0 + A \\ E_S = E'_0 - A \end{cases} \quad \text{Vecteurs propres} = \begin{cases} |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle] \\ |\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle] \end{cases} \quad (8)$$

Ce qui rend plus commode de prendre la base d'états propres d'énergie $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$ qui sont respectivement les états antisymétrique et symétrique.



Nous voyons que, sous l'effet de la perturbation W , les deux niveaux qui étaient dégénérés lorsque A était nul, se séparent. Il apparaît une différence d'énergie égale à $2A$ et les nouveaux états propres sont $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$.



Nous pouvons combiner les états propres pour trouver un vecteur d'état quelconque :

$$|\psi\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle \quad (9)$$

où λ et μ sont des nombre complexes tel que $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$.

Transition. Alors, comment évolue la molécule en fonction du temps ?.

1.4 Evolution temporelle : phénomène d'inversion

Nous pouvons écrire deux combianisons des états propres qui sont particulièrement intéressantes :

$$|\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle) \quad \text{et} \quad |\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) \quad (10)$$

Si on considère qu'à l'instant $t = 0$, la molécule est dans l'état $|\psi_D\rangle$ (particule localisée à droite), son évolution dans le temps se calcule en resolvant l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \leftrightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (11)$$

où E_n sont les valeurs propres de H . On obtient :

$$|\psi(x, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-iE_S t/\hbar} |\psi_S(x)\rangle + e^{-iE_A t/\hbar} |\psi_A(x)\rangle \right) \quad (12)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-E'_0 t/\hbar} \left[e^{iAt/\hbar} |\psi_S(x)\rangle + e^{-iAt/\hbar} |\psi_A(x)\rangle \right] \quad (13)$$

$$= e^{-E'_0 t/\hbar} \left[\cos\left(\frac{At}{\hbar}\right) |\psi_D(x)\rangle + i \sin\left(\frac{At}{\hbar}\right) |\psi_G(x)\rangle \right] \quad (14)$$

Lors d'une mesure effectuée à l'instant t , on trouve donc les probabilités de trouver la molécule dans l'état $|\psi_G\rangle$ ou $|\psi_D\rangle$:

$$P_D = |\langle \psi_D | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2 \left(\frac{At}{\hbar} \right) \quad P_G = |\langle \psi_G | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 \left(\frac{At}{\hbar} \right) \quad (15)$$

La molécule d'ammoniac se retourne périodiquement avec la pulsation $\omega = 2A/\hbar$ qu'on appelle **pulsation de Bohr**, ce retournement étant possible grâce à l'effet tunnel. On nomme cela le **phénomène d'inversion** de la molécule d'ammoniac.

La quantité A contrôle la fréquence de cette oscillation. Dans l'ammoniac la différence d'énergie $2A$ est très petite : $2A \approx 10^{-4} \text{ eV}$. La fréquence ν et la période T correspondantes sont :

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{2A}{h} \approx 24 \text{ GHz} \quad T = \frac{1}{\nu} = \frac{h}{2A} \approx 4,2 \cdot 10^{-11} \text{ s} \quad (16)$$

La longueur d'onde d'onde se situe dans le domaine des micro-ondes ($\lambda = 1,25 \text{ cm}$)

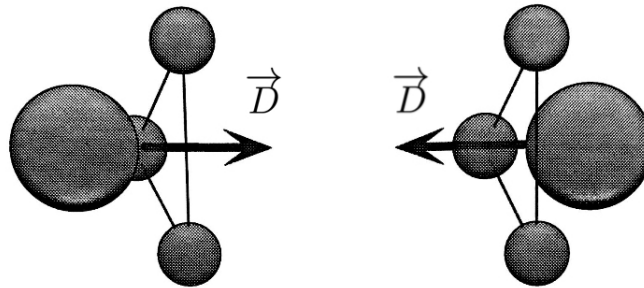
Transition. Ce phénomène d'inversion est associé à l'émission ou à l'absorption d'une onde électromagnétique ce qui joue un rôle clé dans le principe du maser à ammoniac NH_3 .

2 Application. Le Maser à ammoniac

Le maser (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) est un dispositif permettant d'émettre un faisceau cohérent de micro-ondes. Il a été inventé en 1953 à l'université Columbia par Charles Townes, James P. Gordon et Herbert Zeiger.

2.1 Le couplage de NH_3 à un champ électrique

Dans les configurations classiques, la molécule d'ammoniac possède un moment électrique dipolaire \vec{D} . Ce moment dipolaire est porté par l'axe de symétrie de la molécule. L'atome d'azote est électronégatif et attire les électrons, d'où l'orientation de \vec{D} qui change de signe si la molécule se retourne.



On place la molécule dans un champ électrique statique $\vec{\mathcal{E}}$. L'énergie potentielle W de la molécule dans ce champ s'écrit :

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad (17)$$

Nous allons supposer que le champ $\vec{\mathcal{E}}$ est parallèle à x pour simplifier. On travaille dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. On obtient à partir de l'observable \hat{D} :

$$\hat{W} = -\mathcal{E}\hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & -\eta \\ -\eta & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & d_0 \\ d_0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \eta = \mathcal{E}d_0 \quad (18)$$

L'hamiltonien de la molécule est donc :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E'_0 - A & -\eta \\ -\eta & E'_0 + A \end{pmatrix} \quad (19)$$

Cette matrice peut se diagonaliser. Les énergies propres E_+ et E_- et ses vecteurs propres $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont :

$$E_+ = E'_0 + \sqrt{A^2 + \eta^2} \quad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$E_- = E'_0 - \sqrt{A^2 + \eta^2} \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} \quad (21)$$

où $\tan 2\theta = \eta/A$ et $-\pi/4 < \theta < \pi/4$. On voit que lorsque \mathcal{E} est nul, $\eta = 0$ et $\theta = \pi/2$. On retrouve bien les résultats obtenus précédemment :

$$E_+(\mathcal{E} = 0) = E'_0 + A \quad |\psi_+(\mathcal{E} = 0)\rangle = |\psi_A\rangle \quad (22)$$

$$E_-(\mathcal{E} = 0) = E'_0 - A \quad |\psi_-(\mathcal{E} = 0)\rangle = |\psi_S\rangle \quad (23)$$

Transition. Etudier les cas limites par rapport au champ électrique imposé, va nous permettre de comprendre le fonctionnement du maser dans lequel s'opère une séparation des états.

2.2 Séparation des états

Deux cas limites :

- **Champ faible.** Les états propres sont :

$$E_{\pm} \approx E'_0 \pm \left(A + \frac{d_0^2 \mathcal{E}^2}{2A} \right) \quad (24)$$

$$|\psi_-\rangle \approx |\psi_S\rangle + \frac{d_0 \mathcal{E}}{2A} |\psi_A\rangle \quad |\psi_+\rangle \approx |\psi_A\rangle - \frac{d_0 \mathcal{E}}{2A} |\psi_S\rangle \quad (25)$$

En absence de champ, chaque état propre de \hat{H} est symétrique ou antisymétrique et la valeur moyenne du dipôle D dans ces états est nulle. L'effet d'un champ faible est de polariser partiellement la molécule. La valeur moyenne du moment dipolaire induit dans les états $|\psi_-\rangle$ et $|\psi_+\rangle$ est proportionnelle à \mathcal{E} :

$$\langle D \rangle_{\mp} \approx \pm \frac{d_0^2}{A} \mathcal{E} \quad (26)$$

où d_0^2/A est la polarisabilité de la molécule. Elle est grande pour NH_3 car la valeur de A est faible.

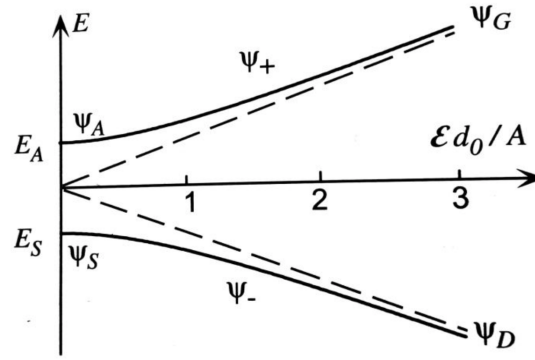
- **Champ fort.** Si le champ est fort, $\eta \gg A$. On obtient :

$$E_{\pm} \approx E'_0 \pm d_0 \mathcal{E} \quad |\psi_{-}\rangle \approx |\psi_D\rangle \quad |\psi_{+}\rangle \approx -|\psi_G\rangle \quad (27)$$

En régime de champ fort, les états propres de l'hamiltonien correspondent à une molécule presque complètement polarisée :

$$\langle D \rangle_{\mp} \approx \pm d_0 \quad (28)$$

Entre ces deux cas limites, on voit que deux effets sont en compétition. Le terme de transition A , dû à l'effet tunnel, tend à symétriser la structure de la molécule et à favoriser les états $|\psi_S\rangle$ ou $|\psi_A\rangle$. La présence du champ la polarise et tend à favoriser au contraire les configurations classiques $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$. On peut voir dans la figure de dessous l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de l'intensité du champ (en unités A/d_0). Le moment électrique dipolaire de l'ammoniac vaut $d_0 \approx 3 \cdot 10^{11} \text{ eV}/(\text{V/m})$. La démarcation entre deux régimes se situe vers $A/d_0 \approx 1,7 \cdot 10^6 \text{ V/m}$. On peut comparer par rapport à la molécule PH_3 (phosphine) où A est beaucoup plus faible, $A/d_0 \approx 30 \text{ V/m}$.



Si on se place en régime de champ faible, le terme $d_0^2 \mathcal{E}^2 / 2A$ peut être interprété comme un terme d'énergie potentielle de la molécule dans le champ. Si on prépare un jet moléculaire qui se propage selon la direction x et on lui fait traverser une région où règne un champ électrique inhomogène, les molécules subissent une force :

$$\vec{F}_{\mp} = \pm \vec{\nabla} \left(\frac{d_0^2 \mathcal{E}^2}{2A} \right) \quad (29)$$

Le signe de cette force dépend de l'état interne de la molécule $|\psi_{-}\rangle$ ou $|\psi_{+}\rangle$. Par conséquence, à la sortie de la zone de champ inhomogène, le faisceau initial sera séparé en deux faisceaux, l'un ne contenant que des molécules dans l'état $|\psi_S\rangle$ et l'autre des molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$. [page 143 X](#). [Faire analogie avec expérience Stern et Gerlach](#). On réalise ainsi une **inversion de population** car l'état le plus peuplé n'est pas l'état fondamental $|\psi_S\rangle$.

Transition Une fois cette inversion de population faite, spontanément, les molécules se désexcitent mais avec une vie moyenne de l'ordre d'un mois. On crée une émission stimulée en soumettant ces molécules à un champ électrique oscillant.

2.3 Champ oscillant et effet maser

Les molécules sélectionnées dans l'état $|\psi_A\rangle$ vont restituer leur énergie $2A$ en retombant dans l'état fondamental $|\psi_S\rangle$. On stimule la desexcitation en soumettant ces molécules à un champ électrique oscillant de pulsation ω : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$, à condition que ω soit accordée à la **pulsation de Bohr** ω_0 du système.

Ne pas faire car je vais faire la même chose dans la partie 3. Passer directement au résultat de la probabilité de transition.

Le hamiltonien est :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E'_0 - A & -\eta \cos \omega t \\ -\eta \cos \omega t & E'_0 + A \end{pmatrix} \quad (30)$$

Le vecteur d'état d'une molécule s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \quad (31)$$

On résout l'équation de Schrödinger $i\hbar(d/dt)|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ ce qui se ramène au système différentiel linéaire du premier ordre :

$$i\hbar \dot{a} = (E'_0 - A)a - \eta b \cos \omega t \quad (32)$$

$$i\hbar \dot{b} = (E'_0 + A)b - \eta a \cos \omega t \quad (33)$$

En posant $a(t) = e^{-i(E'_0 - A)t/\hbar} \alpha(t)$ et $b(t) = e^{-i(E'_0 + A)t/\hbar} \beta(t)$, on obtient :

$$2i\dot{\alpha} = -\omega_1 \beta \left(e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t} \right) \quad (34)$$

$$2i\dot{\beta} = -\omega_1 \alpha \left(e^{-i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t} \right) \quad (35)$$

Ce système fait intervenir trois pulsations :

$$\omega, \quad \omega_0 = 2A/\hbar \quad \text{et} \quad \omega_1 = \eta/\hbar = d_0 \mathcal{E}_0/\hbar \quad (36)$$

Physiquement ce système correspond à des oscillations forcées avec un phénomène de résonance à $\omega = \omega_0$.

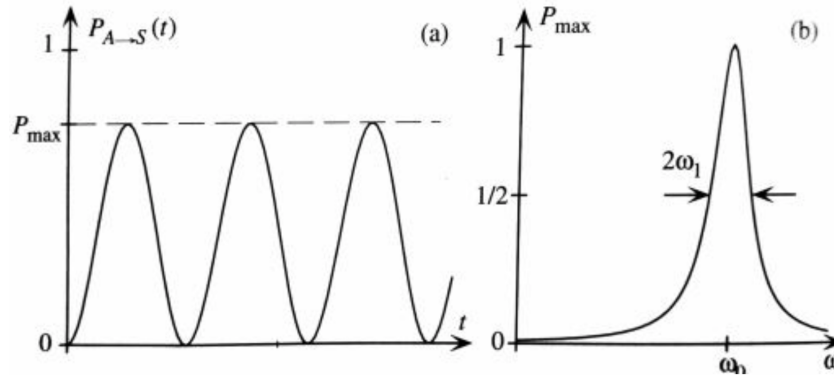
La probabilité de transition $P_{A \rightarrow S}(t)$ qu'au bout du temps t ces molécules, sous l'influence du champ oscillant, soient passées dans l'état $|\psi_S\rangle$ et se soient donc "vidées" de l'énergie $2A = E_A - E_S$ est donné par :

$$P_{A \rightarrow S}(t) \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \frac{t}{2} \right) \quad (37)$$

Cette formule est due à Rabi et on la traitera plus en profondeur dans la partie suivante. Comme on le voit dans la figure de dessous, la probabilité $P_{A \rightarrow S}(t)$ oscille dans le temps entre 0 et une valeur P_{max} qui vaut :

$$P_{max} = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad (38)$$

Lorsqu'on fait varier la pulsation ω du champ appliqué, la probabilité maximale P_{max} a un comportement résonant caractéristique, avec un maximum égal à 1 pour $\omega = \omega_0$.



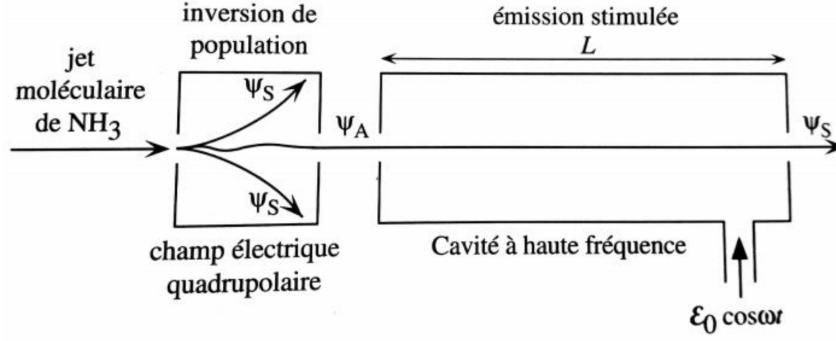
Cette émission d'énergie se fait sous la forme d'un rayonnement électromagnétique de fréquence $\nu = \omega_0/2\pi = 24 \text{ GHz}$. On appelle cela le **phénomène d'émission stimulée**.

Principe et applications du maser

Livre X pags 147-148.

[Tout dans des diapos et rapide](#)

A partir d'un jet moléculaire de vitesse v , on sépare les molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$ par un champ électrique inhomogène. On fait ensuite passer le faisceau dans une cavité où règne un champ $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t)$ et dont la longueur L est ajustée de façon à ce que $L/v = T = (2n + 1)\pi/\omega_1$. A la sortie, les molécules sont dans l'état $|\psi_S\rangle$ et ont restitué à la cavité leur énergie $2A$ sous forme de rayonnement électromagnétique de pulsation ω_0 .



Ce dispositif peut être utilisé comme **amplificateur**, **oscillateur** ou pour obtenir la fréquence de référence utilisée dans les **horloges atomiques**.

Transition. Un deuxième exemple de système à deux niveaux est le spin $1/2$ qui est à la base de la résonance magnétique.

3 Résonance magnétique

Rappeler phénomène de précession du moment magnétique d'une particule lorsqu'elle est soumise à un champ B_0 uniforme. Cette précession se fait à la fréquence de Larmor.

3.1 Position du problème

Comme nous le savons, un proton (par exemple) possède une propriété intrinsèque : le spin. La propriété fondamentale d'une particule de spin $1/2$ est que lors de la mesure de la projection de son spin, suivant un axe quelconque, les seules modalités observées sont les deux valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

Soit \hat{S} l'observable vectoriel spin, on obtient :

$$\hat{S}_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle \quad \hat{S}_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \quad (39)$$

$$\vec{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\hat{\sigma}} \quad (40)$$

où $\vec{\hat{\sigma}} \equiv \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ sont les matrices de Pauli et $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les deux vecteurs propres de la projection de S_z du spin sur Oz .

On peut associer au spin le moment cinétique magnétique :

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma \vec{\hat{S}} \quad \text{où} \quad \gamma = \frac{2\mu_0}{\hbar} \quad (41)$$

Si on place un proton dans un champ magnétique connu B_0 dans la direction z et on superpose un champ magnétique faible B_1 tournant dans le plan xy de vitesse angulaire ω ajustable. On a un champ B de la forme : $\vec{B} = B_0\vec{e}_z + B_1(\cos(\omega t)\vec{e}_x + \sin(\omega t)\vec{e}_y)$.

L'hamiltonien a la forme suivante :

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\mu_0 B_0 \hat{\sigma}_z - \mu_0 B_1 \cos \omega t \hat{\sigma}_x - \mu_0 B_1 \sin \omega t \hat{\sigma}_y \quad (42)$$

$$= \begin{pmatrix} -\mu_0 B_0 & -\mu_0 (\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)) \\ -\mu_0 (\cos(\omega t) + i \sin(\omega t)) & \mu_0 B_0 \end{pmatrix} \quad (43)$$

Posons :

$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle \quad (44)$$

L'équation de Schrödinger mène au système différentiel :

$$i\dot{a}_+ = \frac{\omega_0}{2} a_+ + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \quad (45)$$

$$i\dot{a}_- = \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ - \frac{\omega_0}{2} a_- \quad (46)$$

où $\mu_0 B_0/\hbar = -\omega_0/2$ et $\mu_0 B_1/\hbar = -\omega_1/2$. Où ω_0 est la **fréquence de Larmor**.

Pour résoudre le système, on se place dans le référentiel tournant (\hat{x}, \hat{y}, z) à la vitesse angulaire ω autour de l'axe z . Dans ce référentiel, le champ \vec{B}_1 est indépendant du temps et aligné selon \hat{x} . Le changement de fonction $b_{\pm}(t) = \exp(\pm i\omega t/2) a_{\pm}(t)$ donne :

$$i\dot{b}_+ = -\frac{\omega - \omega_0}{2} b_+ + \frac{\omega_1}{2} b_- \quad (47)$$

$$i\dot{b}_- = \frac{\omega_1}{2} b_+ + \frac{\omega - \omega_0}{2} b_- \quad (48)$$

Dans cette base, l'hamiltonien ne dépend pas du temps :

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix} \quad (49)$$

On obtient $\ddot{b}_{\pm} + (\Omega/2)^2 b_{\pm} = 0$ où on définit :

$$\boxed{\Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad (50)$$

où Ω est ce qu'on appelle la **pulsation de Rabi**.

Si on suppose que le spin est initialement dans l'état $|+\rangle$, soit $b_-(0) = 0$. On trouve alors :

$$b_-(t) = -\frac{i\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (51)$$

$$b_+(t) = \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\omega - \omega_0}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (52)$$

3.2 Oscillations de Rabi

La probabilité de passer dans l'état $|-\rangle$ est :

$$P_{+\rightarrow-}(t) = |\langle\psi(t)|-\rangle|^2 = |a_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 \quad (53)$$

$$= \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (54)$$

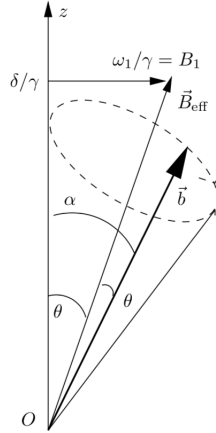
Cette formule met en évidence le phénomène de résonance (on obtient la même relation que précédemment dans le cas de l'effet maser) :

- Si on choisit $\omega = \omega_0$ alors $\Omega = \omega_1$ et la probabilité de basculement de spin est égale à 1 aux temps $t = (2n + 1)\pi/\omega_1$ (n entier), même si l'amplitude du champ tournant est très faible.

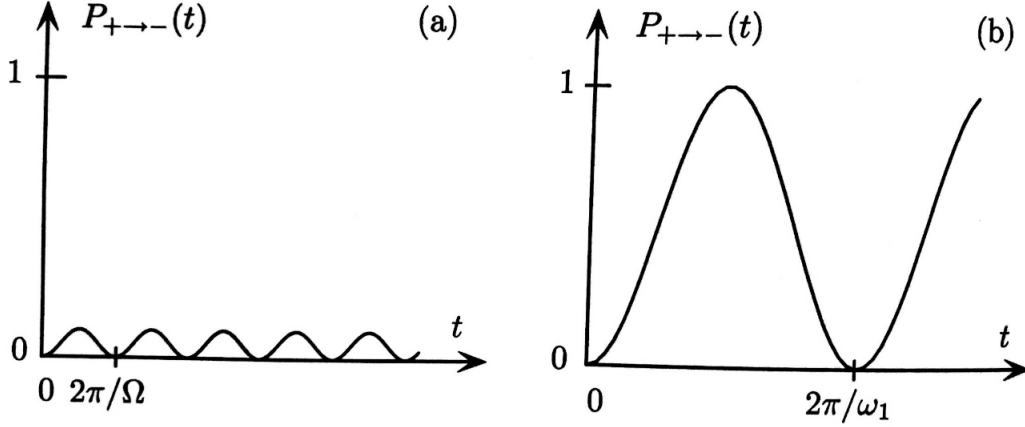
On peut aussi donner une interprétation géométrique du phénomène : à la résonance, la précession de Larmor est de fréquence $\omega_0 = \omega$, et cette précession est exactement compensée par la rotation du référentiel. Il reste donc uniquement la précession de Larmor due à \vec{B}_1 qui s'effectue autour de $O\hat{x}$, puisque \vec{B}_1 est aligné suivant $O\hat{x}$.

- Si la fréquence ω du champ tournant est choisie sensiblement différente de ω_0 , la probabilité que le spin bascule est très faible pour tout t .

On peut aussi donner une interprétation géométrique de ces résultats hors résonance. Si on se place dans un référentiel tournant à vitesse $\omega \neq \omega_0$ et $\vec{B}_1 = 0$, la précession de Larmor s'effectue dans le référentiel tournant à la vitesse angulaire $\delta = \omega - \omega_0$. La particule voit un champ magnétique effectif \vec{B}_{eff} et précesse autour de ce champ à la fréquence angulaire Ω .



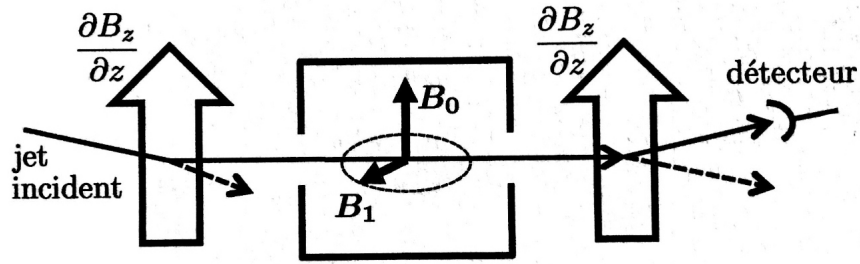
On peut voir dans la figure ci-dessous l'oscillation temporelle de la probabilité $P_{+\rightarrow-}(t)$ en dehors de la résonance et à la résonance. Pour un champ magnétique typique d'un Tesla, la fréquence de résonance pour un proton est de l'ordre de 43 MHz.



3.3 Applications

Expérience de Rabi

L'effet de résonance que nous venons de décrire a été compris en 1939 par Rabi. Cette méthode fournit une méthode très précise de **mesure d'un moment magnétique**. La figure suivante montre une version simplifiée de l'appareil de Rabi. Il comporte deux déflecteurs de Stern et Gerlach identiques.



Entre les deux déflecteurs se trouve une zone où on a superposé un champ uniforme \vec{B}_0 et un champ tournant \vec{B}_1 .

Les deux aimants de Stern et Gerlach vont dévier vers le haut une particule qui se trouve dans l'état $|\psi_+\rangle$. Si la fréquence ω du champ tournant est proche de ω_0 , le phénomène de résonance va faire basculer le spin et la particule sera défléchée vers le bas par le second aimant et donc pas comptée par le détecteur. Le signal enregistré par le détecteur en fonction de la fréquence du champ tournant présente donc une baisse sensible quand $\omega = \omega_0$. Cela conduit à une mesure du rapport :

$$\frac{|\mu|}{j} = \frac{\hbar\omega_0}{B_0} \quad (55)$$

pour une particule de moment cinétique j .

En 1933 Stern avait mesuré le moment magnétique du proton à 10 % près. Grâce à son dispositif de résonance, Rabi gagne, en 1939, un facteur 1000 en précision. Il obtient un prix Nobel en 1944.

RMN

Parler en ouverture. **Je ne comprends pas...**

Conclusion

Nous avons mis en évidence un système quantique à deux niveaux lors de l'étude de la molécule d'ammoniac. La barrière de potentiel et l'effet tunnel ont permis d'étudier le phénomène du couplage et l'importance de se ramener aux états propres de l'Hamiltonien pour comprendre l'évolution d'un tel système.

Cette étude nous a permis de comprendre le fonctionnement du maser à ammoniac et l'importance du phénomène de résonance. Le maser est utilisé en tant qu'amplificateur, oscillateur ou pour obtenir la fréquence de référence utilisée dans les horloges atomiques.

Finalement nous avons aussi traité le phénomène de résonance magnétique, ce qui a des applications innombrables dans des domaines très variés de la physique, chimie, biologie ou la médecine. Par exemple, la RMN a transformé l'analyse chimique et la détermination de la structure des molécules.

Tous ces phénomènes reposent sur la mécanique quantique.