LP43-Evolution Temporelle d’un Système physique à 2 niveaux

# Notes A partir du Feynman

## Hamiltonien

Le hamiltonien est une observable qui est lié à l’évolution temporel d’un système physique. L’équation de Schrödinger permet d’obtenir l’évolution des différents états d’un système physique si l’on connait l’expression du Hamiltonien.

Exemple : pour un système à 2 états et Les équations d’évolutions du système physique sont :

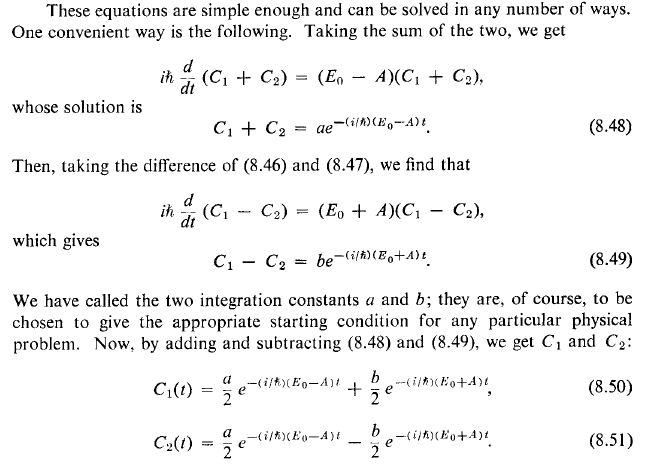
* + Avec

D’habitude, on écrit car on fait une projection sur la base des positions.

## Molécule d’ammoniac

Si on considère la molécule d’ammoniac (isolée) dans un bon référentiel (pas d’impulsion spatiale ni angulaire) en négligeant les vibrations, il reste deux états possibles pour la molécule. Soit les atomes d’hydrogène sont au dessus, soit au dessous de l’atome d’azote.

On s’est donc ramené moyennant qq hypothèse à un système à 2 états. Concentre sur 2 états de la molécule d’ammoniac.

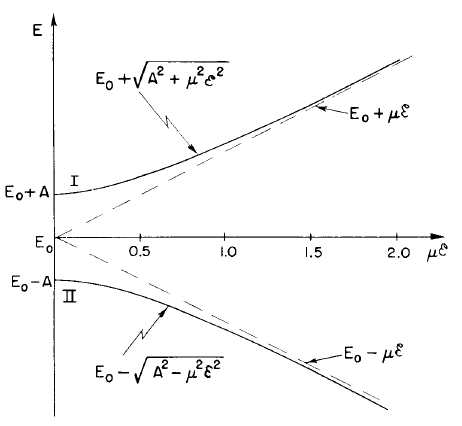
**Forme du hamiltonien : .**  et sont les énergies qui correspondent aux états stationnaires. Comme la molécule est symétrique (les deux états sont superposables), il est nécessaire que . Comme la molécule peut traverser une barrière d’énergie pour aller d’un état 1 à l’état 2, les coefficients diagonaux ne peuvent être nulles. Ces deux coefficients doivent être les mêmes à une phase près. *Il n’y a pas de perte de généralité si nous les prenons égales (en effet dans les formules des énergies on aboutit à la norme de A donc on s’en fout de la phase).* La diagonalisation de la matrice est simple. Et mène à 2 états Feynman (volume 3 chapitre 8) :

**Le couplage implique deux niveaux d’énergie :** Commenter les modes symétriques (b = 0) et antisymétriques (a=0). C’est parce que la molécule d’ammoniac peut passer de l’état1 à l’état 2 que l’énergie de la molécule n’est pas juste Chacun des deux états de la molécule possède deux niveaux d’énergie (.

**Etats stationnaire (même chose dites avec des mots différents):** Par définition, c’est un état dont l’amplitude ne varie pas (à une phase près) et dont l’énergie est bien définie (ie l’état est vecteur propre du hamiltonien). Les états a = 0 et b= 0 sont des états propres de niveaux d’énergie .

**Analogie avec les deux masses couplées par des ressorts :** Mais ce ne sont pas vraiment les mêmes équations. Equation d’un oscillateur harmonique. Et ici équation du premier ordre ??

**Energie Ordre de grandeur :** exciter un électron, il faut des photons de haute énergie (UV ~5eV). Pour exciter les vibrations il faut des photons dans l’IR (1eV), pour exciter les rotations ce sont des photons dans le bas infrarouge, mais la différence d’énergie est très en dessous de cela (micro-onde 10^-4 eV, , ). La transition émet des micro-ondes.

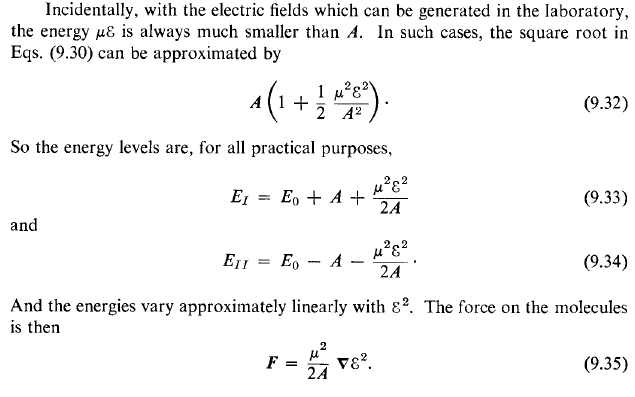
 **Sensibilité à un champ électrique :** Si l’on considère l’impossibilité du couplage entre les deux états, l’énergie du système en présence d’un champ *E* dirigé perpendiculairement au plan des H est et . Le champ n’affecte pas la géométrie de la molécule et donc n’affecte pas l’amplitude du couplage. .

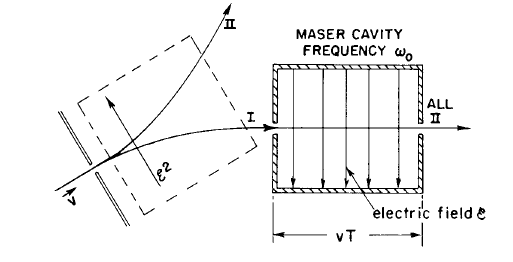
**La recherche des niveaux d’énergie après application du champ :**

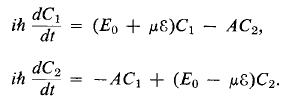
Quand les deux états de positions ont une grande différence d’énergie, la possibilité du basculement devient négligeable (cf. graphe ci-dessus).

**Principe du fonctionnement du maser à ammoniac :** MASER = Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation. On sépare les molécules de chaque état stationnaire et Les molécules dans le niveau d’énergie le plus élevé, passent à travers une cavité résonnante de 24 GHz. Les molécules transmettent une énergie à la cavité et sortent dans l’état L’énergie délivrée est de l’énergie électrique.

**Comment séparer les deux états stationnaires ?** On crée un fin jet d’ammoniac gazeux grâce à un système de fentes. Un champ électrique est ensuite appliqué transversalement au faisceau et qui en plus présente un gradient transversalement. Les molécules dans l’état ont une énergie qui augmente avec l’intensité du champ et vont donc se diriger vers une les zones de champ faible. Les molécules dans l’état vont au contraire se diriger vers les zones de fort champ. Dans le détail, les interactions que subissent les molécules sont résumées ci-dessous Comment obtenir la force ? :

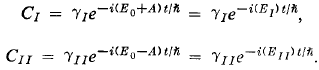


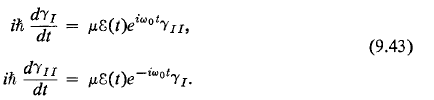
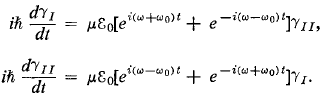


**Comportement d’une molécule dans un champ électrique variable :** Hamiltonien variable par la composante du champ E. On part des équations du hamiltonien pour écrire les équations de bases couplées.

En faisant la somme et la différence, on obtient des équations avec et qui sont les amplitudes des états propres sans champ électrique.

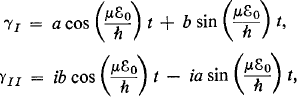
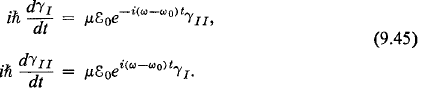
Le champ E (ronde) dépend du temps. Les solutions générales ne sont pas exprimables avec des fonctions élementaires.

**On fait l’hypothèse d’un champ faible**. C’est-à-dire que l’on exprime les solutions comme ayant la même forme que les solutions sans le champ electrique mais avec une amplitude et dépendant du temps mais lentement comparé aux exponentielles. La dérivée de doit prendre en compre la dépendance temporelle de . En réécrivant les équations couplées, on obtient (9.41) et (9.42) qui après simplification donnent :



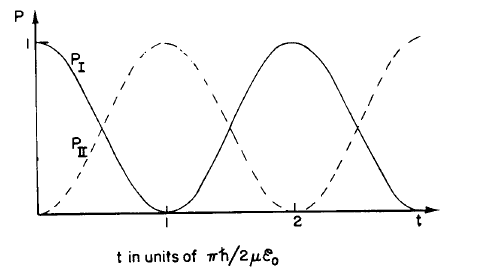
Ces équations ne peuvent toujours pas se résoudre dans le cas général. Remplaçons le champ par son expression :

Hypothèse de variation lente de car le champ est faible. On peut donc supprimer les termes de variations rapides dans le membre de droite. Si est suffisamment proche de on peut conserver un des 2 termes. Avec un champ electrique faible, les seules solutions sont (9.45) avec les deux pulsations très proches.

**Cas d’une résonance parfaite : .** En découplant les deux équations, on trouve

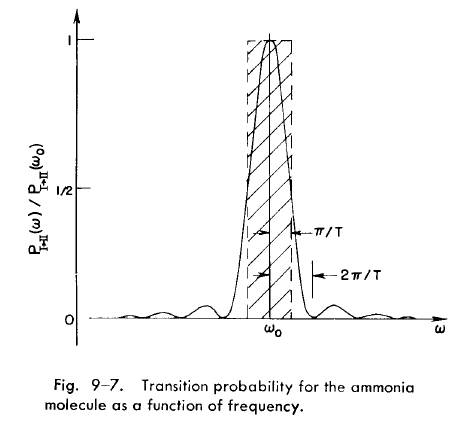
On trouve donc des solutions sous la forme :

**Ajout des contraintes sur les états à l’entrée de la cavité : et .**

Donc a = 1 et b=0. En probabilité, on obtient les 2 courbes :

Si la cavité a une taille telle que la molécule mette un temps , alors elle ressortira avec un niveau d’énergie plus bas. La molécule à transmis son énergie à la cavité. En réalité, en raison d’une distribution des vitesses des molécules d’ammoniac, elles ne passent pas toutes de l’état I à II. L’efficacité n’est pas de 100%. Une autre difficulté est que comme la molécule a une vitesse, elle ne perçoit pas le champ à la fréquence imposée.

**Si on n’est pas tout à fait à la résonance.** Approximation : le temps dans la cavité est très petit devant le temps caractéristique de transition. On suppose que =1. En intégrant, une des équations de couplage, on obtient la probabilité de transition



**[Absorption de la lumière](https://tex.stackexchange.com/questions/171088/how-can-i-typeset-the-reduced-planck-constant-%E2%84%8F)**

On peut réécrire les probabilités de transitions en foncion de l’intensité du champ incident puis en intégrant sur l’ensemble des fréquences on obtient une probabilité de passer de l’état I à l’état II. On aurait trouvé la même probabilité de passer de l’état II à l’état I. Donc on vient de discuter d’un mécanisme d’absorption et d’émission stimulée de la lumière.

Commentaire sur l’expression de la probabilité de transition

(i) Cette proba est proportionnelle au temps d’exposition au champ. Donc il existe une probabilité *constante* par unité de temps que la transition ait lieu. (ii) La probabilité est proportionnelle à l’intensité du champ. (iii)La probabilité est proportionnel à c’est-à-dire à la « force du couplage ». On rappelle que est le terme de couplage du système avec le champ E dans l’hamiltonien.

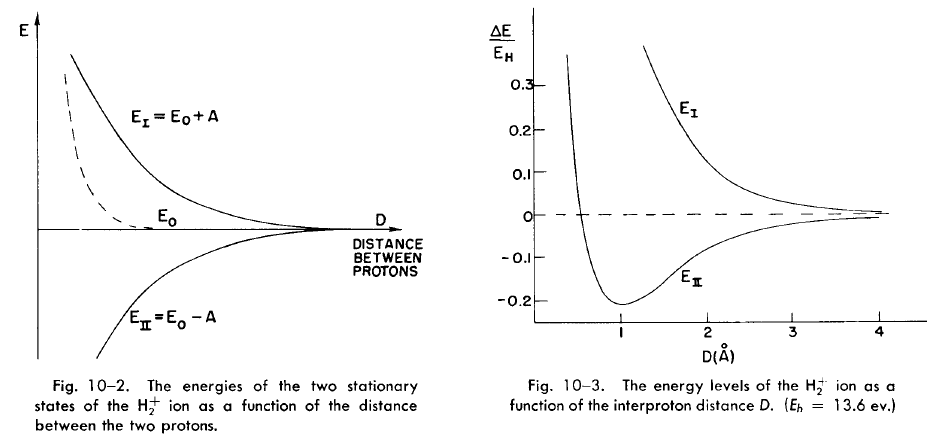
# Molécule H2+ Feynmann

**Etat |1> et |2> :** Les protons sont très loins l’un de l’autre (pas de couplage). L’électron est sur le premier cation|1>. L’électron est sur le 2e cation |2>. On considère seulement les états fondamentaux (électron et cation non excité). Chacun des états à une énergie . On note la composante du hamiltonien relative au couplage des deux états. Couplage s’explique par effet tunnel.

**Etat propre du système couplé : |I>, |II> :** On connait les solutions.

et et. Solution symétrique et antisymétrique (référence au pendule couplé).

**Evolution des énergies et en fonction de la distance entre les 2 protons :** Par effet tunnel, on montre que plus les protons sont proches, plus le couplage est fort et donc plus augmente. Cela implique une variation de l’énergie et avec A. L’état est défavorable au rapprochement des deux cations alors que favorise le rapprochement. *Ce second état est donc la source d’origine quantique de l’énergie de liaison de la molécule H2+.*

**Répulsion coulombienne entre les deux protons :** Donc n’est plus constant mais croit lorsqu’on se rapproche de 0. Ce qui mène aux courbes :

**Interprétation de l’énergie de liaison avec heisenberg :** Pour l’état I : Déconfinement de l’électron 🡪 diminuer l’énergie cinétique. Pour l’état II : fonction |II> antisymétriuqe 🡪 confinement + grand et donc une énergie cinétique plus grande.

**Molécule asymétrique** : On montrer que l’énergie de liaison est plus faible.

# Notes Maser Poly X

**Pourquoi on s’intéresse qu’aux états du niveau fondamental :** Car l’état d’énergie supérieur est de 0.12 eV>>23meV. Et l’écart entre les 2 niveaux d’ammoniac engendré par le couplage est 0.0001 eV.

**Vocabulaire :** Base des états propres vs base des configurations de l’équilibre classique. Terme de transition.

**Effet du champ E :** Le terme de transition A, dû à l’effet tunnel, tend a symetriser la structure de la molecule et a favoriser les etats ψS, ou |ψA. La présence du champ la polarise et tend à favoriser au contraire les configurations classiques |ψD et |ψG

# Résumé du maser (Pierre)

**Analyse de la molécule d’ammoniac :** Deux états couplés (par effet tunnel) entrainent l’apparition de 2 états propres symétriques et antisymétriques (analogie avec pendule couplé). C’est un premier niveau d’abstraction étant donné que les 2 états stationnaires sont obtenus par superpositions des états « intuitifs » gauche et droit (ou haut et bas).

**Comment la molécule réagit-elle à un champ électrique :** On commence par exprimer le hamiltonien (méthode de Feynman ou méthode de Dalibard). Le champ entraine un couplage des états symétriques et antisymétriques. Ce qui modifie les niveaux d’énergie et la formule des états propres. Angle theta = force du couplage. (i) Champ faible 🡪 polarisation partielle des états propres qui s’écrivent comme combinaison linéaire des états symétriques et antisymétriques sans champ E. (ii) Champ fort : Les états propres sont de nouveaux les états « intuitifs » gauche et droite et les énergies sont celles obtenues classiquement (prise en compte de l’énergie potentielle d’interaction champ/dipole). La polarisation est celle de la molécule d’ammoniac (+ do ou -do). Le terme de transition A, dû à l’effet tunnel, tend a symetriser la structure de la molecule et a favoriser les etats ψS, ou |ψA. La présence du champ la polarise et tend à favoriser au contraire les configurations classiques |ψD> et |ψG>.

**Inversion de population :** On isole l’état antisymétrique. Grâce à un champ électrique inhomogène.

**Emission stimulé/absorption :** La mise en contact de l’état symétrique avec un champ résonant à une pulsation proche de celle correspondant à l’état de transition 2A, provoque l’oscillation de rabi : au bout d’un certain temps la probabilité de passage du niveau antisym au niveau sym est maximale. Puis ensuite on a absorption.

**La modélisation du système à 2 niveaux permet d’expliquer le phénomène d’absorption et d’émission spontanée.** On a juste besoin de l’équation d’évolution et du formalisme matriciel.

**Application :** (?) Mathevet

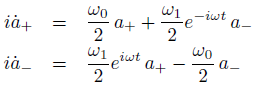
# Résonance Magnétique Nucléaire

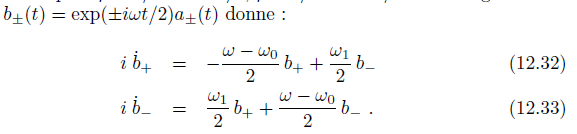
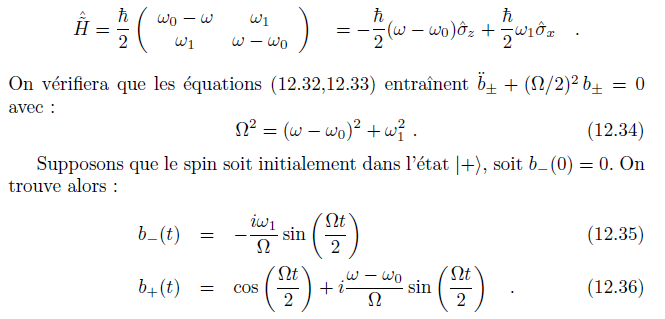
**Variables d’espace et de Spin non corrélées :** Normalement les états de position et de spin sont corrélés ex : Stern-Gerlach (atome d’argent position différente suivant leur spin). Toutefois, corrélations faibles dans ce cas on considère comme indépendant les variables positions et spin. On se ramène à un système de vecteur 2 dimensions (12.21). On ne traitera pas les états de positions.

**Mesure du facteur gyromagnétique  :** On montre que la valeur moyenne de chaque composante du spin placé dans un champ magnétique précesse autour de l’axe du champ (z) à la pulsation (signe – convention Dalibard…) qui correspond à l’écart entre les 2 niveaux d’énergie. Il suffit donc de capter le flux du champ magnétique avec une bobine. La mesure du courant induit nous permet de remonter à puis à

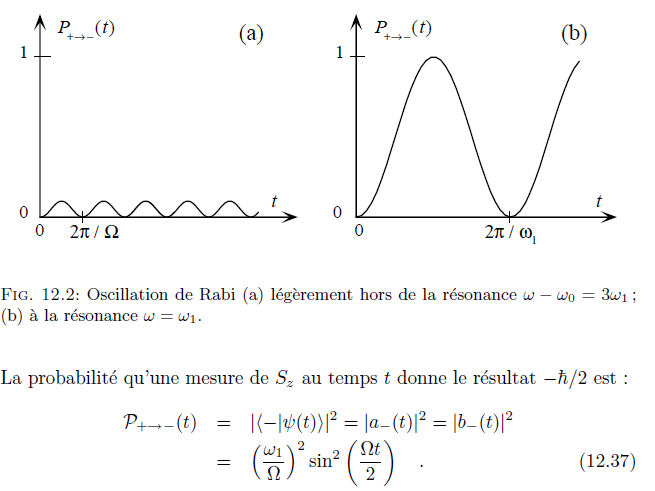
**Superposition d’un champ fixe et d’un champ tournant  (**calcul semblable au cas du maser 😊 **):** On cherche une solution sous la forme d’une combinaisons des anciens états propres avec des amplitudes dépendantes du temps.

**La nouvelle équation de Schrödinger (avec le champ variable )**

**mène aux équations couplées :**

**Changement de variable (ie. Changement de référentiel, on se place dans le référentiel tournant du champ B1). Dans cette base l’hamiltonien est indep du temps**

**Probabilité de transition :**



Pourquoi l’énergie  ? est inférieur à

Pourquoi A = A ? racine carré de A^2

Forme des courbes des fonctions d’onde

Pourquoi deux états alors qu’il suffit de tourner la molécule ?

Force interprété comme une énergie potentielle.

Notion de force n’a pas de sens.

1’48.

Expérience de Stern et Gerlach : Lien entre la molécule d’ammoniac ???? Pourquoi le lien

E’0 est a un niveau inférieur à E0. Explorer + d’espace… Repenser ce qu’est l’énergie. Forme locale

Etat liant/Etat antiliant : Liaison covalente du point de vue de la physique quantique. Levé d’une dégénérescence.

Filtrage pour le laser à ammoniac : 47’00. Faire parler les éléments de physique

50’30 : Emission stimulée. On a un champ classique !!! pas de somme de photons !! Situation délicate. Description continue d’un phénomène corpusculaire 52’00. Emission stimulée à souligner. Description semi-classique du champ électromagnétique. Une description corpusculaire permettrait d’interpréter l’émission comme une émission stimulée. 53’00. Si j’avais fait une descritpion corpusculaire, je pourrais que lorsque je suis en haut, j’ai un retournement de l’état, je passe par un niveau d’énergie qui a exactement 54’14. On a compris que le formalisme ne permet pas de parler de cela.

Bas de la sinusoide, un état physique au milieu, superposition d’état.

Phénomène d’absorption 55’35.

Le role de la cavité : 56’16 ; Elle est en résonnance avec la fréquece de transition. Elle permet de garder le photon. Facteur de qualité grand !

Retournement de l’état : pulse pi 57:30. Sphère de bloch. Un sens dans cette leçon…58’15

Résonance Magnétique Spin. Les système à 2 niveaux jouent un rôle générique. L’oscillateur harmonique car dvpt au voisinage d’un potentiel. Système physique extrèmement varier. Qbit. Espace de dimension 2 avec un niveau fondamental et un niveau excité. Extrèmement varié. Spin ½. Configuration dans la molècule d’ammiac. Dans un point quantique quantim dot, lacune d’azote dans les diamants. 2 niveaux internes d’un atome. C’est la brique de base du calcul quantique. Qu’est ce que je peux dire sur un système à 2 niveaux statique et un système forcé. Système abstrait à 2 niveaux que ce soit des atomes electrons etc. 1 :01. Cela justifie la logique de la leçon

Résonance Magnétique Nucléaire : Ordre de grandeur de B0 (1Tesla) et l’ordre de grandeur de B1. Source de dissipation qui fait qu’on doit aller relativement vite. Si je veux retourner un spin. Je vais appliquer un champ B0. Et je vais appliquer un champ qui est dans une direction orthogonal 1 ;02. Le champ magnétique dont on a besoin doit être très important. car il faut que cela soit rapide. Il y a de le dissipation. Problématique physique. Ethode plus simple. Pulse dans une direction y. Mais environnement thermique. Champ B0 montreux de l’ordre du tesla. Supraconducteur pour engendrer des champs de l’ordre du tesla. Un pulse de type tesla c’est une histoire de fou. Dissipation joule dans tout ce qui est conducteur. Si on est a température abiante, champ montrueux. Forcage, induit par B1. La valeur de B1 peut être toute petite. Omega = omega0. La précision est donné par omega1. 1’’05. Forcage = astuce retourner un spin avec des champ tout petit mais en choisissnat de manière précise la fréquence. Champ constant selon Y j’aurai réussi aussi . Conscient de ces enjeux là !! 1’’06. Passage dans les référentiels tournants compact physique sans les calculs. Dans le référentiel tournant tout se passe comme si on avait un champ électrique effectif. On peut faire cela avec des dessins h=-miB(t) Si un chgt dans le référentiel tournant. H = -mu Beff. Beff : raisonnement donne une précession avec le champ effectif. On court circuite les calculs. En négligeant la physique.

Ne pas se réfugier derrière les calculs. La physique ressort.

1 :17 : Astuce RMN. Pris à payer 1’20. Fréquence de B1 très précise.

Classique 1’28. Mode propre et battement.

2’05 :