

Compte-rendu de leçon

LP41: Évolution temporelle d'un système quantique à deux niveaux.

Nicolas NIO - Thomas STOURM

Correctrice: Emmanuelle DELEPORTE

Cette leçon est nouvelle cette année, elle a remplacé une leçon sur les modes propres, et une leçon sur la RMN a également été enlevée, il peut donc être intéressant de la développer dans cette leçon en application. Je présente le plan que j'ai fait durant ma leçon, qui s'est révélé trop long et pas assez centré sur le sujet, je donnerai ensuite un exemple de plan qu'il vaut mieux faire.

Niveau : L3

Pré-requis : formalisme de la méca Q, équation de Schrodinger, système à 2 niveaux, effet Zeeman.

Intro : Exemple de systèmes à deux niveaux (spin 1/2, polarisation du photon...) traités dans un cadre statique. On traite le système à deux niveaux car c'est le plus simple mais également car plusieurs systèmes peuvent être approchés de la sorte (niveaux de l'atome dans un laser, molécule d'ammoniac...).

1 Résolution générale

On décrit le système utilisé : 2 niveaux $|1\rangle$ et $|2\rangle$, écartés en énergie de $\Delta E = \hbar\omega_0$, avec l'origine des énergies entre les deux. On considère un hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, avec $|1\rangle, |2\rangle$ les états propres de \hat{H}_0 .

On connaît l'état $|\psi(t=0)\rangle$ du système, on cherche $|\psi(t)\rangle$.

1.1 cas sans couplage

Évolution des états propres, avec uniquement apparition du déphasage, la probabilité de trouver le système dans un état différent est nulle pour tout t .

1.2 Cas avec couplage

On considère \hat{V} toujours diagonal. Si ce n'est pas le cas on rentre les termes diagonaux dans le hamiltonien propre.

ATTENTION : cette approche peut amener des questions dérangeantes, on verra comment l'éviter dans les remarques.

Afin de faciliter les calculs, on prend l'état $|\psi(t)\rangle$ sous la forme : $|\psi(t)\rangle = \gamma_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + \gamma_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle$, cela permet de faire sauter le terme du hamiltonien propre dans les équations...

On en déduit deux équations différentielles couplées sur les coeffs.

1.3 Approximation perturbative

Regarder les remarques, ces calculs ne sont pas nécessaires, ils sont développés à la fin...

On fait un développement par rapport à un paramètre λ : on pose $\hat{V} \rightarrow \lambda\hat{V}$ et les coefficients sous la forme $\gamma = \gamma^0 + \lambda\gamma^{(1)} + \lambda^2\gamma^{(2)} + \dots$, puis on pose les équations correspondant aux différents ordres (cf BD, chap 17).

On récupère l'expression de γ_2 (si on dit qu'on est parti de l'état $|1\rangle$) sous la forme d'une fonction de t , on pose formellement l'expression de γ_2 comme une intégrale.

Préciser que cette approximation a un cadre d'application : temps courts et perturbation faible.

2 Cas particuliers

2.1 Couplage constant

On prend $\hat{V} = \hat{V}_0$ pour $t \in [0, T]$ et 0 sinon. On traite le calcul avec l'approximation perturbative., on récupère une fonction $f(T, \omega_0) = \frac{\sin^2(\omega_0 T/2)}{(\omega_0/2)^2}$ qui correspond au calcul de l'intégrale qui apparaît souvent, on peut donc la tracer explicitement et commenter.

On observe que pour $\omega > 2\pi/T$, f est très faible, donc que la probabilité de couplage le sera aussi. On en déduit une relation entre la durée de la perturbation et l'écart énergétique entre deux niveaux qu'on pourra coupler : pour avoir une probabilité correcte, il faut $\Delta E \ll \frac{2\pi}{\hbar T}$.

2.2 Couplage sinusoïdal

On prend $\hat{V} = \hat{V}_0 \cos(\omega t)$, on développe le cos grâce à la formule d'Euler et on obtient 2 termes dans l'intégrale. On néglige les termes croisés dans le module carré. On a alors 2 fonctions $f(T, \omega_0 + \omega)$ et $f(T, \omega_0 - \omega)$. On explique ainsi l'égalité des coefficients d'Einstein en optique, pour l'émission stimulée et l'absorption : si on ne considère que le cas $\omega > 0$, suivant que le système passera de $|1\rangle$ à $|2\rangle$ (pulsation $+\omega_0$, absorption) ou de $|2\rangle$ à $|1\rangle$ (pulsation $-\omega_0$, émission stimulée), ce n'est pas la même fonction qu'on considère mais le coefficient devant reste le même.

Autre exemple : l'effet Stark avec un champ électrique oscillant le champ E du laser est très faible devant le champ coulombien perçu par l'atome, d'où la validité de l'approximation.

2.3 Oscillations de Rabi

J'ai fait les calculs sur transparents, ils sont dans tous les livres de cours de méca Q.

3 Application : la Résonance Magnétique Nucléaire

cf BD p 260, tout le calcul y est traité

3.1 Position du problème

Un champ fixe \mathbf{B}_0 fixe, qui lève la dégénérescence par effet Zeeman, et un champ tournant $\mathbf{B}_1 = B_1(\cos(\omega t)\mathbf{x} + \sin(\omega t)\mathbf{y})$.
En développant le calcul (expression de $\hat{H}_1 = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}_1$ en utilisant les matrices de Pauli) on retrouve le hamiltonien qu'on a posé pour les oscillations de Rabi.

3.2 L'expérience de Rabi

cf BD chap 262

3.3 Utilisations usuelles

On développe des exemples d'application de la RMN :

En chimie : (cf cours de chimie sur la spectroscopie) On utilise le fait que des protons dans des environnements différents n'auront pas la même fréquence de résonance. On balaie ici "**spectralement**" la molécule en repérant des fréquences de résonance. On a ainsi une idée sur l'environnement de chaque proton, mais la géométrie explicite n'est pas donnée.

NB : On peut balayer le spectre en fréquence en faisant varier ω_0 (en jouant sur la valeur du champ B_0), ou directement en faisant varier ω , fréquence de la perturbation. (Merci Marion).

En médecine (IRM : Imagerie par Résonance Magnétique) : On se place à une fréquence fixée, et on balaie **spatialement** le corps du patient pour relever la densité en cellules, ce sont les protons de l'eau qui sont alors pris en compte.

Dans le cas de cancérologie : ils n'auront pas le même environnement suivant qu'ils sont dans une cellule saine ou une cellule "malade", cancéreuse.

Dans le cas d'IRM du cerveau : On peut maintenant suivre "en direct" le fonctionnement du cerveau lorsqu'un patient réfléchit. Lorsqu'une des zones du cerveau est utilisée, il y a un afflux de sang dans cette région, donc un déplacement perceptible à la l'IRM.

Questions et Remarques

Précisions sur le couplage pur : Attention, lorsqu'on considère un couplage V qui a des termes diagonaux, si on les fait rentrer dans le hamiltonien propre, l'écart en énergie entre les deux niveaux (ω_0) change aussi. Dans de très rares cas (cavités oscillantes Pérot-Fabry) ces termes diagonaux peuvent dépendre du temps...

Est-ce que les oscillations de Rabi nécessitent une résolution perturbative ? : NON!! Le calcul est exact!

Peut-on avoir des oscillations de Rabi avec des niveaux dégénérés ? : Oui (la question venait de la relation entre E et T exprimée dans le cas du couplage constant).

Les autres questions étaient sur des points particuliers que j'avais expliqués.

La principale remarque a été de faire attention aux notations utilisées, ce que je n'ai pas fait dans la leçon : il faut conserver les indices 1 et 2 dans tout le calcul, en disant à chaque fois lequel des deux est l'état de départ (alors que j'avais aussi utilisé les indices i et f , et $+$ et $-$ pour les spins), cela rend la leçon compliquée (au moins) à suivre.

D'après Mme Deleporte, les oscillations de Rabi sont centrales sur cette leçon. Il faut les traiter en entier, en déroulant le calcul.

Pour revenir sur le plan de la leçon, celui ci est beaucoup trop long (sachant

que je n'ai développé presque aucun calcul) pour tenir. Je propose d'enlever la partie sur la résolution perturbative qui ne sert en fin de compte à rien, et de traiter tout une partie sur les oscillations de Rabi :

I- Système à deux niveaux

A Cas sans couplage (à faire !)

Bien expliquer l'évolution temporelle des états propres.

Utiliser le vocabulaire de la méca Q : dans les calculs sur les vecteurs de base, on projette, etc... Exemple de couplage propre : la levée de dégénérescence de 2 spins par un champ B_0 ...

B Cas avec couplage

Est-ce qu'il serait nécessaire de traiter le cas du couplage de façon générale?...

II- Les oscillations de Rabi

On pose le hamiltonien des oscillations. On déroule tout le calcul : Lorsqu'on calcul les probabilités de transition, on calcul d'abord les nouvelles énergies du système, puis les états associés $|\psi_+ \rangle$ et $|\psi_- \rangle$, et c'est sur ces deux états (propres maintenant !) qu'on développe l'état de départ. -> on revient au cas de la partie IA.

On précise bien les conséquences : courbes de probabilités à résonance, sans résonance, etc...

III- Application : la RMN

A Mise en place

On utilise un champ fixe B_0 sur des spins -> on pose ω_0

On utilise un champ tournant B_1 , on développe le hamiltonien de couplage et on retrouve les éléments utilisés dans les oscillations de Rabi.

Cette partie sert à se raccrocher à tout ce qu'on a fait dans les deux parties précédentes.

B Expérience de Rabi

C Applications

Calcul de la résolution perturbative(pour les amateurs)

Les deux équations sur les coefficients récupérées en projetant l'équation de Schrodinger sont :

$$i\hbar\dot{\gamma}_1 = \gamma_2 e^{-i\omega_0 t} \langle 1|\hat{V}|2 \rangle \quad (1)$$

$$i\hbar\dot{\gamma}_2 = \gamma_1 e^{i\omega_0 t} \langle 2|\hat{V}|1 \rangle \quad (2)$$

En utilisant le développement en puissances de λ , on obtient plusieurs systèmes d'équation : ordre 0 :

$$\dot{\gamma}_1^{(0)} = 0 \quad (3)$$

$$\dot{\gamma}_2^{(0)} = 0 \quad (4)$$

Ordre 1 :

$$i\hbar\dot{\gamma}_1^{(1)} = \gamma_2^{(0)} e^{-i\omega_0 t} \langle 1|\hat{V}|2 \rangle \quad (5)$$

$$i\hbar\dot{\gamma}_2^{(1)} = \gamma_1^{(0)} e^{i\omega_0 t} \langle 2|\hat{V}|1 \rangle \quad (6)$$

On suppose qu'on est dans l'état 1 à $t=0$, on arrive à

$$i\hbar\dot{\gamma}_2^{(1)} = e^{i\omega_0 t} \langle 2|\hat{V}|1 \rangle \quad (7)$$

D'où

$$\gamma_2^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_0 t'} \langle 2|\hat{V}(t')|1 \rangle dt' \quad (8)$$

Il reste à prendre le carré du module pour obtenir la probabilité formelle de transition de 1 vers 2 en fonction du temps. On remarquera que c'est juste une TF, donc simple à calculer !