SCIENCES SORBONNE UNIVERSITÉ

AGRÉGATION DE PHYSIQUE

Master de physique
2022-2023

TD 5: Systèmes à deux niveaux – Résonance magnétique nucléaire

1 Systèmes quantiques à deux états

De nombreux problèmes de physique quantique peuvent se ramener à l'étude d'un système à deux niveaux. C'est exactement le cas de la dynamique d'un spin 1/2 par exemple, mais aussi des approximations de systèmes à plus de degré de liberté.

On considère par exemple deux atomes isolés (H et Cl pour fixer les idées). On suppose qu'une seule orbitale ϕ_i d'énergie ε_i est accessible pour chacun des atomes. Lorsqu'on rapproche les deux atomes, un couplage entre les deux états s'établit. Dans la base $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$, le hamiltonien du système possède alors des termes croisés non nuls $\left\langle \phi_2 \middle| \hat{H} \middle| \phi_1 \right\rangle = \left\langle \phi_1 \middle| \hat{H} \middle| \phi_2 \right\rangle^\star = W$.

1. Écrire le hamiltonien total du problème sous forme matricielle et calculer ses énergies propres E_+ et E_-. Si on avait $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, justifier l'appellation de *levée de dégénerescence*.

On pose $\Delta = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ (le *désaccord*) et $\overline{E} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$. De façon similaire à l'étude du spin 1/2 [1], les états propres d'un tel système peuvent s'écrire sous la forme

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = +\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{\varphi}{2}}\,|\phi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\frac{\varphi}{2}}\,|\phi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{\varphi}{2}}\,|\phi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\frac{\varphi}{2}}\,|\phi_2\rangle \end{cases} \qquad \text{avec } \sin^2\theta = \frac{4|W|^2}{4|W|^2 + \Delta^2} \text{ et } W = |W|\,\mathrm{e}^{i\varphi}. \tag{1}$$

1. Réécrire les énergies propres en fonction de $\overline{E}$ et Δ, et les tracer en fonction de Δ en maintenant $\overline{E}$ constant, pour plusieurs valeurs de $|W|$ (dont $W = 0$).
2. Supposons que l'on prépare le système dans l'état $|\phi_1\rangle$ à $t < 0$, puis qu'on branche subitement le couplage W entre les atomes. Exprimer l'état $|\psi(t)\rangle$ du système en fonction du temps.
3. Calculer la probabilité qu'il soit après un temps t dans l'état $|\phi_2\rangle$, et la tracer en fonction du temps. On choisira différentes valeurs de Δ.

2 Résonance magnétique nucléaire

L'objectif de cet exercice est de décrire le mouvement d'un moment magnétique dans un champ magnétique composé d'une partie statique et d'une partie oscillante. C'est le principe de la RMN, à la base de nombreuses applications dont une technique de caractérisation en chimie et de l'imagerie (IRM) en médecine.

On considère un champ magnétique $\vec{B} = B_0\vec{e_z} + \vec{B_1}(t)$ où B_0 est un fort champ statique (quelques teslas) et $\vec{B_1}(t)$ est un champ magnétique tournant à la pulsation Ω (typiquement dans les radio-fréquences) dans le plan xOy. La force du champ B_1 est plusieurs ordres de grandeur en-dessous de B_0.

Approche classique

Afin de résoudre l'équation d'évolution du moment $\vec{\mu}(t)$, on se place dans un référentiel $\mathcal{R}'$ tournant à Ω selon l'axe Oz. Soit $(\vec{e_X}, \vec{e_Y}, \vec{e_z})$ une base orthonormée du référentiel $\mathcal{R}'$ superposée à la base cartésienne $(\vec{e_x}, \vec{e_y}, \vec{e_z})$ de $\mathcal{R}$ à $t = 0$. On pose $\omega_1 = -\gamma B_1$ et $\omega_0 = -\gamma B_0$. On rappelle que

$$\left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}'} = \left.\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}} - \Omega\vec{e_z} \wedge \vec{\mu}(t). \tag{2}$$

1. Déduire de Eq. (2) l'équation du mouvement de $\vec{\mu}(t)$ dans le référentiel tournant. Montrer que cela revient à étudier le mouvement d'un moment dans un champ magnétique effectif *statique* $\vec{B}_{\text{eff}}$ dont on donnera l'expression en fonction de γ, $\Delta\omega = \Omega - \omega_0$ et ω_1.

1. L'analogie avec le spin peut être poussée très loin, tout système à deux degrés de liberté peut s'écrire sous la forme d'un spin fictif.

2. Commenter le mouvement du moment dans le référentiel $\mathcal{R}'$ en fonction des valeurs de $\Delta\omega$ et ω_1. Tracer son évolution temporelle.

Approche quantique

1. Rappeler l'expression des matrices des opérateurs de moment cinétique propre $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ des états propres de $\hat{S}_z$. Montrer que la matrice du hamiltonien peut s'écrire

$$(H) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1\,\mathrm{e}^{-i\Omega t} \\ \omega_1\,\mathrm{e}^{i\Omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

On s'intéresse à la dynamique d'un état $|\psi\rangle$ qu'on décompose sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ en :

$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)\,|+\rangle + a_-(t)\,|-\rangle \tag{4}$$

1. Soit l'état quantique $|\phi(t)\rangle = b_+(t)\,|+\rangle + b_-(t)\,|-\rangle$ tels que $b_\pm(t) = \mathrm{e}^{\pm i\frac{\Omega t}{2}}\,a_\pm(t)$. Écrire les équations vérifiées par les coefficients $b_\pm(t)$. Quel est l'équivalent classique de ce changement de variables ? En déduire que cela revient à résoudre l'équation matricielle

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\phi\rangle}{\mathrm{d}t} = \tilde{H}\,|\phi\rangle \tag{5}$$

avec $\tilde{H}$ une matrice 2×2 indépendante du temps que l'on exprimera.

2. En utilisant les résultats du premier exercice, calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\tilde{H}$.

3. On suppose que $|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle$. Montrer que $\mathcal{P}_{+-} = |\langle -|\phi(t)\rangle|^2 = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2$. En déduire l'expression de $\mathcal{P}_{+-}(t)$ en fonction de ω_1 et $\Delta\omega$.

4. Tracer et discuter ce résultat pour $\Delta\omega = 0$ et $2\sqrt{2}\omega_1$. Justifier la dénomination de « résonance » magnétique.