

# LP43 - Évolution temporelle d'un système quantique à deux niveaux

Correcteurs : G. Aubert et S. Lacroix<sup>1</sup>

Leçon présentée le jeudi 16 février 2017  
Balkis Dohni et Amélie Chardac

## 1 Commentaires du jury

**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.

Jusqu'en 2014, le titre était : *Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique et en mécanique quantique.*

Jusqu'en 2013, le titre était : *Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique, modes propres. Systèmes à deux niveaux d'énergie en physique quantique. Analogies et différences.*

**2009, 2010** : Le phénomène de battement (et son analogue quantique) est au cœur de la leçon.

**2005** : La notion de mode propre doit être parfaitement maîtrisée.

**2000** : Bien que couramment utilisé comme exemple de système quantique à deux niveaux, l'inversion de l'ammoniac est un exemple délicat, car le terme de couplage  $y$  est difficile à interpréter physiquement. On peut trouver d'autres systèmes à deux niveaux, plus simples à présenter.

## 2 Plan proposé

### I Résonance magnétique

- I.1 Position du problème
- I.2 Traitement quantitatif

### II Molécule d'ammoniac

- II.1 Position du problème
- II.2 Cas des puits non couplés
- II.3 Cas des puits couplés
- II.4 Evolution temporelle : phénomène d'inversion

### III Maser

- III.1 Description
- III.2 Champ électrique oscillant

---

1. sylvain.lacroix@ens-lyon.fr

### 3 Commentaires généraux sur la leçon

Cette présentation de leçon a été dans l'ensemble bien réussie. L'exposé était clair et agréable à suivre. Le contenu de la leçon et les réponses aux questions démontrent une bonne maîtrise du sujet et un travail sérieux.

Le plan (commenté plus en détails dans la section suivante) repose sur deux exemples classiques de systèmes quantiques à deux niveaux : des systèmes de spins  $1/2$  et la molécule d'ammoniac. Le premier trouve son application dans la résonance magnétique, le second dans le principe du MASER. L'élève a terminé sur les horloges atomiques et leur fonctionnement.

La leçon, sous son titre actuel, est relativement récente. Avant 2014, elle concernait aussi les oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique et leur analogies et différences avec les systèmes quantiques à deux niveaux, ce qui demandait donc un approfondissement moindre des exemples quantiques. C'est pourquoi il y a peu de commentaires du jury vraiment pertinents pour la préparation de cette leçon.

Les exemples traités dans cette présentation semblent bien adaptés à la nouvelle leçon. On pourrait également citer l'ion  $H_2^+$  ou la molécule d'éthylène, mais les deux exemples précédents semblent plus aisés à présenter et justifier. Le commentaire du jury de 2015 (et donc le seul qui concerne la leçon purement quantique) mentionne l'importance des régimes forcés : il est donc bien de traiter les phénomènes de résonance magnétique et/ou le MASER (ce qui permet en plus de discuter d'applications concrètes). Les horloges atomiques rentrent aussi dans le cadre de la leçon et constituent des outils importants dans la physique expérimentale contemporaine.

La grande majorité des calculs dans cette leçon repose seulement sur la manipulation de matrices deux par deux et leur diagonalisation. Bien qu'il ne soit pas nécessaire de présenter tous ces calculs en détails au tableau, il faut être capable de les justifier sans hésitation, notamment au vu de leur simplicité. Il est aussi très important de toujours spécifier clairement dans quelle base est écrite chaque matrice. Il faut insister lors de la présentation de la leçon sur la similitude des calculs dans les différents exemples de systèmes à deux niveaux, ce qui permet de réutiliser les résultats des parties précédentes rapidement.

L'élève a choisi ici de présenter d'abord la résonance magnétique de spins, puis la molécule d'ammoniac et le MASER. Ce choix peut se justifier par le fait que les calculs des oscillations de Rabi en RMN peuvent se faire sans approximation, alors que la résonance dans le MASER est plus compliquée à étudier. Le choix inverse peut aussi se faire : il permet de présenter les systèmes à deux niveaux avec une complexité croissante (deux états découplés de même énergie pour le double puits infini, puis couplage et levée de dégénérescence pour le double puits fini et enfin forçage extérieur et résonance avec le champ électrique et le MASER).

Il faut distinguer les systèmes quantiques qui possèdent réellement deux niveaux (spins  $1/2$ , polarisation des photons, ...) de ceux qui peuvent se traiter de manière effective comme des systèmes à deux niveaux (molécule d'ammoniac, ...). Pour les exemples relevant de la seconde catégorie, il est bien de discuter la pertinence de cette approximation, notamment en comparant les énergies mises en jeu dans les autres niveaux. C'est le cas par exemple de la molécule d'ammoniac, dont la description complète comprend de nombreux autres phénomènes que l'inversion (vibrations, rotations, ...).

## 4 Retour sur le plan présenté

L'introduction peut être assez courte. On peut insister ici sur l'idée d'un formalisme général des systèmes à deux niveaux, qui permet de traiter de manière uniforme divers exemples.

### 4.1 Résonance magnétique

#### 4.1.1 Position du problème

On présente ici le système : une particule de spin  $1/2$  (dans ce cas un proton), plongée dans un champ magnétique tournant. On peut passer rapidement sur le lien entre moment magnétique et moment cinétique, mais il faut s'attendre à des questions dessus (analogie classique, origine du facteur de Landé, ...). Les deux états considérés ici sont les spins up et down.

On pourrait (selon le temps et la position de cette partie dans le plan) présenter le système de manière plus progressive. Pour un proton isolé, ces deux états ont la même énergie. On lève cette dégénérescence grâce à un champ magnétique extérieur constant. La superposition de ce champ avec un champ tournant va ensuite permettre d'introduire un forçage, avec des phénomènes de battement et de résonance.

#### 4.1.2 Traitement quantitatif

L'évolution temporelle du système est gouvernée par l'équation de Schrodinger, qui est une équation différentielle linéaire couplée à deux dimensions. Celle-ci peut se résoudre en se plaçant dans le référentiel lié au champ tournant. Quelques étapes de calculs permettent de découpler les équations et de trouver les modes propres du système (ce qui revient à diagonaliser le hamiltonien). On peut alors résoudre l'équation de Schrodinger de manière explicite et sans approximation.

On s'intéresse alors à la question suivante : si on part dans l'état initial d'un spin up, avec quelle probabilité le spin va être mesuré dans l'état up au temps  $t$ ? Le calcul effectué précédemment permet de déterminer cette probabilité, qui prend la forme d'une sinusoïde de pulsation  $\Omega$ , la pulsation de Rabi. L'amplitude de ces oscillations est contrôlée par le rapport entre  $\omega_1$  et  $\Omega$  et est maximale à la résonance  $\omega = \omega_0$ . Il faut insister ici sur le fait que le forçage par un champ extérieur tournant permet de basculer entre les états up et down et que ce phénomène est maximal à la résonance.

Ce phénomène trouve son application dans la RMN : en mesurant la pulsation de résonance  $\omega_0$ , on remonte à la valeur du champ extérieur  $B_0$ . Ceci donne des indications sur l'environnement chimique des molécules, qui a pour effet "d'écranter" le champ extérieur ressenti par ces molécules.

### 4.2 Molécule d'ammoniac

#### 4.2.1 Position du problème

La leçon aborde maintenant un second exemple : la molécule d'ammoniac. Celle-ci forme un système quantique complexe, possédant de nombreux degrés de liberté (translation, rotation, vibration, ...). Pour pouvoir la traiter comme un système à deux niveaux, il faut faire l'hypothèse que ces degrés sont figés et ne peuvent pas être excités : on s'intéresse alors seulement à la position de l'atome d'azote par rapport au plan des hydrogènes. Il est bien de justifier la pertinence de cette approximation, en donnant un ordre de grandeur des énergies des niveaux d'excitation de ces autres degrés de libertés. On pourra notamment comparer ces énergies à la température ambiante afin de vérifier si ces niveaux peuvent être excités thermiquement.

Une fois l'étude restreinte à la position  $x$  de l'atome d'azote par rapport au plan des hydrogènes, on cherche à modéliser ce système par un système quantique à une dimension. Des arguments qualitatifs généraux permettent de donner la forme du potentiel  $V(x)$  associé. On fait alors le choix d'approximer ce potentiel comme un double puits fini.

#### 4.2.2 Cas des puits non couplés

On commence par traiter le cas où le double puits est infini, ce qui revient donc au cas de deux puits de potentiel non couplés. La résolution de ce problème peut se faire de manière exacte. On obtient alors une infinité d'états, localisés dans les puits et plus ou moins excités.

Parmi ces états, on distingue deux états fondamentaux de même énergie  $\Psi_G$  et  $\Psi_D$ , correspondant à l'atome d'azote dans l'état fondamental du puits gauche ou dans l'état fondamental du puits droit. Ces états sont des états stationnaires de l'hamiltonien : si l'atome d'azote est dans un des puits à l'instant initial, il y restera toujours.

#### 4.2.3 Cas des puits couplés

On considère maintenant le double puits fini. La résolution exacte de ce problème peut se faire (au moins partiellement) mais est bien plus technique que celle du double puits infini. On va alors se restreindre à une résolution plus qualitative et phénoménologique : on va considérer deux états  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$ , localisés principalement à gauche et à droite du plan des hydrogènes, d'énergie  $E'_0$ , couplés par un terme d'effet tunnel  $A$ . On modélise ceci comme un système quantique à deux niveaux dont le hamiltonien est une matrice non diagonale.

Les états propres de cet hamiltonien sont des combinaisons symétrique  $\Psi_S$  et antisymétrique  $\Psi_A$  des configurations  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$ , d'énergies respectives  $E'_0 - A$  et  $E'_0 + A$ . Le couplage des puits a notamment pour effet de lever la dégénérescence des énergies.

Cette modélisation est justifiable par la résolution exacte du double puits fini. Il n'est pas possible de présenter cette résolution ici, mais il est bien d'en connaître les grandes étapes. On commence par résoudre l'équation de Schrodinger stationnaire dans les différentes régions du potentiel puis on raccorde ces solutions aux frontières. C'est cette dernière étape qui est à l'origine de la quantification des énergies.

Les deux états de plus basses énergies obtenus par cette méthode sont les états  $\Psi_S$  et  $\Psi_A$ . Notons ici que techniquement, les états  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  correspondant ne sont pas égaux aux états  $\Psi_G$  et  $\Psi_D$  des puits découplés. On considère qu'ils correspondent aux configurations gauche et droite de l'atome d'azote car ils sont principalement localisés d'un seul côté.

En considérant un atome initialement dans "l'état gauche"  $\Psi_1$ , on peut calculer les probabilités de présence dans les états  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  à l'instant  $t$  en repassant par les états stationnaires  $\Psi_S$  et  $\Psi_A$ . On observe que ces probabilités oscillent, avec une fréquence proportionnel au couplage tunnel  $A$ . On a donc un phénomène de retournement de la molécule (c'est d'ailleurs en mesurant sa fréquence que l'on remonte expérimentalement à la valeur de  $A$ ).

### 4.3 MASER

L'élève a terminé son plan en présentant le fonctionnement du MASER à ammoniac. La section précédente avait mis en évidence l'existence de deux états propres de l'hamiltonien  $\Psi_S$  et  $\Psi_A$ , d'énergies  $E_0 - A$  et  $E_0 + A$ . Une molécule d'ammoniac dans l'état  $\Psi_A$  se désexcitant et passant à l'état  $\Psi_S$  libère une énergie  $2A$  sous la forme d'un rayonnement centimétrique. On souhaiterait utiliser ce phénomène pour produire des micro-ondes.

Attention aux confusions, cette désexcitation n'est pas liée au phénomène d'inversion étudié dans la section précédente. L'état  $\Psi_A$  étant un état stationnaire de l'hamiltonien, une molécule

dans l'état  $\Psi_A$  à l'instant initial y restera, du moins théoriquement, pour toujours. Dans les faits, ces états se désexcitent spontanément, mais sur une échelle moyenne de temps de l'ordre de 2 mois, ce qui rend toute application concrète impossible. Le principe du MASER est de forcer cette désexcitation grâce à un champ électrique extérieur.

Ce principe repose sur un phénomène très proche des oscillations de Rabi étudiées dans la partie sur la résonance magnétique. Ici, l'élève a été très rapide, en présentant juste des résultats sur transparents à la résonance et en extrapolant grâce aux résultats de la section 1. Un calcul exact n'est pas possible pour le MASER : la complication par rapport à la résonance magnétique vient de la présence de termes oscillants de pulsations  $\omega - \omega_0$  et  $\omega + \omega_0$ . En se plaçant proche de la résonance  $\omega = \omega_0$ , on peut négliger les termes de pulsation  $\omega + \omega_0$ , qui oscillent très rapidement. On retrouve alors les mêmes équations que pour la résonance magnétique et on a donc des oscillations de Rabi.

On montre notamment que la probabilité de désexcitation d'une molécule dans l'état  $\Psi_A$  oscille à la fréquence  $\Omega$  et que l'amplitude de ces oscillations est égale à 1 à la résonance. C'est ce qui permet d'assurer la désexcitation des molécules dans le MASER.

L'élève a terminé cette section par une description des horloges atomiques, dont le principe repose sur l'effet MASER. Ces horloges ont des applications importantes dans la physique contemporaine : elle sont actuellement les outils de mesure du temps les plus précis et constituent la définition moderne de la seconde. Elles sont utilisées dans les GPS et ont permis historiquement de mettre en évidence expérimentalement le phénomène de dilatation des durées en relativité restreinte.

## 4.4 Conclusion

L'élève a conclu rapidement, arrivant à la fin du temps imparti. Il n'est pas nécessaire ici de redétailler les exemples étudiés. Il paraît plus pertinent de redonner les considérations générales sur les systèmes quantiques à deux niveaux, notamment en parlant des phénomènes d'inversion et d'oscillations de Rabi par forçage extérieur. On peut ouvrir en citant d'autres exemples de systèmes à deux niveaux. On peut aussi citer, si l'on se sent à l'aise sur le sujet, les applications de ces systèmes à l'informatique quantique, basées sur la notion de qbit.

## 5 Questions posées

- Peut-on justifier semi-classiquement la relation entre le moment magnétique et le moment cinétique d'une particule ?
- Qu'est-ce que le facteur de Landé ? Que vaut-il dans le cas d'un moment de spin ? D'un moment orbital ? D'une combinaison des deux ?
- Vous avez cité des valeurs typiques de champs magnétiques utilisés pour la RMN : cela correspond-il à des champs magnétiques forts ? Comment peut-on produire de tels champs magnétiques ?
- Dans le phénomène d'oscillation de Rabi, quelle est la forme de l'amplitude des oscillations en fonction de la fréquence  $\omega$  ? Comment mesurer grâce à ça la fréquence  $\omega_1$  ? (largeur de la distribution Lorentzienne)
- Les états  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  du double puits fini sont-ils égaux aux états  $\Psi_G$  et  $\Psi_D$  du double puits infini ?
- Dans le double puits, combien existe-il d'états propres de l'Hamiltonien ? Quelles sont leur énergie ? Pourquoi peut-on se restreindre aux deux premiers états ?

- Si une molécule d'ammoniac est à l'instant initial dans l'état  $\Psi_A$ , peut-elle passer à l'état  $\Psi_S$  au bout d'un certain temps ? Au bout de combien de temps ?
- Quelle est la longueur d'onde du rayonnement obtenu par l'effet MASER ?
- Comment se modélise le couplage de la molécule d'ammoniac avec un champ électrique extérieur ? Qualitativement, comment est le moment dipolaire de la molécule ?
- Peut-on résoudre les calculs de l'effet MASER en dehors de la résonance ?
- Quelles sont les applications des horloges atomiques ?