

# LP43 EVOLUTION TEMPORELLE D'UN SYSTEME QUANTIQUE A DEUX NIVEAUX

16 juin 2020

MONNET Benjamin &

## Niveau : L3

## Commentaires du jury

## Bibliographie

➤ *Mécanique quantique*, **Basdevant**

➤ *Physique quantique*, **Le Bellac**

→ A quoi ser ce livre ?

→

## Prérequis

➤

## Expériences

☞

## Table des matières

|          |  |          |
|----------|--|----------|
| <b>1</b> | <b>La molécule d'ammoniac</b>                      | <b>2</b> |
| 1.1      | Modèle . . . . .                                   | 2        |
| 1.2      | Effet tunnel de l'ammoniac . . . . .               | 2        |
| <b>2</b> | <b>Evolution libre d'un système à deux niveaux</b> | <b>3</b> |
| 2.1      | Base et Hamiltonien . . . . .                      | 3        |
| 2.2      | Evolution libre et oscillations . . . . .          | 3        |
| <b>3</b> | <b>Evolution avec forçage électrique : MASER</b>   | <b>4</b> |
| 3.1      | Champ électrique . . . . .                         | 4        |
| 3.2      | Oscillations de Rabi . . . . .                     | 4        |
| 3.3      | Application au MASER . . . . .                     | 5        |
| 3.4      | Analogie avec la RMN . . . . .                     | 5        |

## Introduction

Il existe des systèmes dont l'étude peut se restreindre à l'étude de 2 niveaux d'énergie. De tels systèmes sont même directement utilisés pour des applications tels que la mesure de la seconde ou bien la RMN. Nous allons donc essayer d'expliquer le fonctionnement d'un système à deux niveaux.

↓ Afin de mettre les choses en place, prenons un exemple d'application concret : la molécule d'ammoniac

## 1 La molécule d'ammoniac

### 1.1 Modèle

La molécule d'ammoniac a une forme pyramidale dont l'un des sommets est un atome d'azote. Une telle molécule a de nombreux degrés de liberté : rotation, vibration ou encore excitation des électrons. L'azote peut aussi passer d'un côté ou de l'autre du plan formé par les trois hydrogènes, ce qui est possible grâce à l'effet tunnel. Justifions que l'on puisse se limiter à une étude où tous les degrés de liberté sont gelés, sauf le déplacement de la molécule d'azote par effet tunnel :

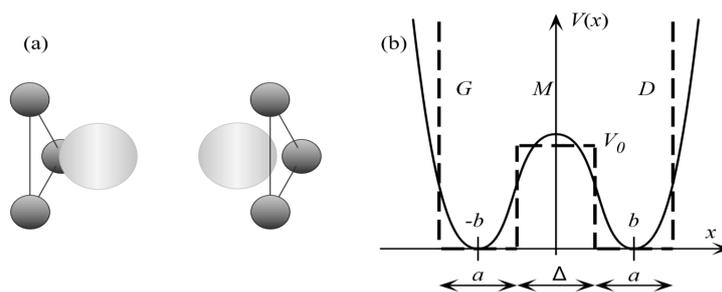
- L'énergie entre les deux configurations est de  $2A \approx 10^{-4} eV$
- L'énergie d'excitation des électrons est de l'ordre de quelques eV
- Les énergies de vibration sont de l'ordre de 0.1 eV
- Les énergies de rotations sont séparées d'environ  $10A$

Autrement dit, toutes les transitions d'énergie sont au moins un ordre de grandeur plus grandes que celle qui nous intéresse.

### 1.2 Effet tunnel de l'ammoniac

Le but de cette partie est de trouver les niveaux d'énergie de l'ammoniac.

Si on considère comme modèle deux puits infinis, on a bien entendu aucune chance que l'azote passe de la gauche vers la droite donc on ne s'intéressera pas à ce cas là. On modélise le potentiel de la manière suivante :



Source : Mécanique quantique, Basdevant

Dans ce cas-là, on peut appliquer la méthode que l'on connaît et chercher des solutions stationnaires. On rappelle que la fonction spatiale  $\psi(x)$  de la fonction d'onde suit l'équation stationnaire de Schrödinger :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

Par principe de Curie, la symétrie de du potentiel impose à la fonction d'onde d'être symétrique ou anti-symétrique. Ainsi, la solution se présente sous la forme :

$$\begin{aligned} \text{région G :} & \quad \psi(x) = \pm \lambda \sin k(b + a/2 + x) \\ \text{région M :} & \quad \psi(x) = \begin{cases} \mu \cosh(Kx) & \text{solution symétrique} \\ \mu \sinh(Kx) & \text{solution anti-symétrique} \end{cases} \\ \text{région D :} & \quad \psi(x) = \psi(x) = \pm \lambda \sin k(b + a/2 + x) \end{aligned}$$

où  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $K = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ . Cette solution s'annule bien pour  $x = \pm(b + a/2)$ . En utilisant pour finir la continuité de la dérivée aux points  $x = \pm(b - a/2)$ , on obtient deux familles de solutions :

$$\begin{aligned} \text{Solution symétrique } \psi_S &: \quad \tan(ka) = -\frac{k}{K} \coth K(b - a/2) \\ \text{Solution anti-symétrique } \psi_A &: \quad \tan(ka) = -\frac{k}{K} \tanh K(b - a/2) \end{aligned}$$

On peut alors, par résolution graphique, obtenir les énergies des deux niveaux les plus bas et donc par conséquent une valeur de la différence d'énergie  $2A$  (Wolfram). Cela permet de retrouver l'ordre de grandeur qui a été donné plus tôt. On notera les niveaux d'énergie  $E_0 \pm A$

## 2 Evolution libre d'un système à deux niveaux

### 2.1 Base et Hamiltonien

La partie précédente nous a permis de trouver une base dans laquelle l'hamiltonien est diagonale : dans la base  $(\psi_S, \psi_A)$ , l'hamiltonien s'écrit :

$$\begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$$

### 2.2 Evolution libre et oscillations

Ainsi, pour un état donc les coefficients sont donnés par :

$$\Phi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

L'évolution de l'état est la suivante :

$$\Phi(t) = \begin{pmatrix} a_0 e^{-iE_S t/\hbar} \\ b_0 e^{-iE_A t/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iE_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} a_0 e^{i\omega_0 t/2} \\ b_0 e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix}$$

avec  $\omega_0 = \frac{2A}{\hbar}$  appelée fréquence de Bohr. Intéressons-nous au cas où l'atome d'azote commence à droite. On remarque que l'on peut former les deux vecteurs :

$$\psi_D = \frac{\psi_S + \psi_A}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \psi_G = \frac{\psi_S - \psi_A}{\sqrt{2}}$$

Avec les propriétés de symétrie de  $\psi_A$  et  $\psi_S$ , on comprend alors instinctivement que  $\psi_D$  correspond à l'atome d'azote à droite et  $\psi_G$  correspond à avoir l'atome d'azote à gauche. Ainsi, si on considère qu'à l'instant  $t = 0$ , la molécule d'ammoniac était à droite, alors :  $a_0 = b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$  et donc :

$$\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} \\ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix}$$

Autrement dit, dans la base  $(\psi_G, \psi_D)$ , on a :

$$\Phi(t) = e^{-iE_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} i \sin(\omega_0 t/2) \\ \cos(\omega_0 t/2) \end{pmatrix}$$

La probabilité d'être à gauche vaut donc  $P_G(t) = \cos^2(\omega_0 t/2)$  et  $P_D(t) = \sin^2(\omega_0 t/2)$ . On voit donc que l'atome d'ammoniac oscille de gauche à droite par effet tunnel.

*Il est possible de modifier ces oscillations en rajoutant un champ électrique. On rajoute donc un forçage. c'est l'objet de la troisième partie.*



### 3 Evolution avec forçage électrique : MASER

#### 3.1 Champ électrique

La molécule à un moment dipolaire  $\vec{d}$  perpendiculaire au plan des atomes d'hydrogène. Lorsque l'on rajoute un champ électrique, l'énergie est modifiée d'une quantité :

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

On se limite au cas où le champ électrique est selon  $Ox$ , donc aligné avec le moment dipolaire  $\vec{d}$  de l'ammoniac. Dans la base  $(\psi_D, \psi_G)$ , nous introduisons l'opérateur position :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

de telle sorte que  $X\psi_D = 1$  et  $X\psi_G = -1$ . Ainsi, l'opérateur  $X$  nous donne une idée de la position de l'atome d'ammoniac. On admettra que l'énergie rajoutée par l'interaction avec le champ électrique peut se mettre sous la forme :

$$W = \begin{pmatrix} 0 & -\eta \\ -\eta & 0 \end{pmatrix}$$

car la matrice  $X$  dans la base  $(\psi_S, \psi_A)$  vaut :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi, l'hamiltonien vaut donc :

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta(t) \\ -\eta(t) & E_0 + A \end{pmatrix}$$

Nous allons dans la suite nous intéresser à un champ oscillant, c'est à dire de la forme  $\eta(t) = \eta \cos(\omega t)$

#### 3.2 Oscillations de Rabi

On cherche à connaître l'évolution d'un état évoluant selon un tel hamiltonien. En notant l'état  $\psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ , l'équation de Schrödinger donne :

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a} &= (E_0 - A)a - \eta b \cos(\omega t) \\ i\hbar \dot{b} &= (E_0 + A)b - \eta a \cos(\omega t) \end{aligned}$$

On opère ensuite le changement de variable suivant :  $a(t) = e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} \alpha(t)$  et  $b(t) = e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} \beta(t)$ . En notant  $\omega_1 = \frac{\eta}{\hbar}$ , on obtient :

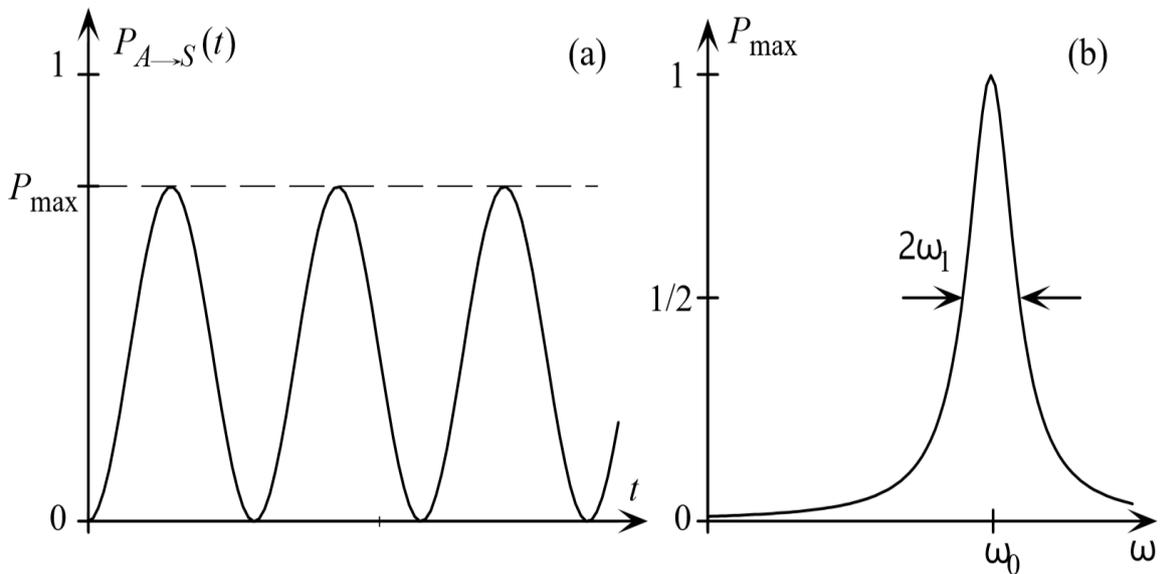
$$\begin{aligned} 2i\dot{\alpha} &= -\omega_1 \beta (e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t}) \\ 2i\dot{\beta} &= -\omega_1 \alpha (e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t}) \end{aligned}$$

Un tel système n'est pas soluble. Néanmoins, en faisant l'approximation que l'on se situe proche de la résonance ( $\omega \approx \omega_0$ ), on peut simplifier les termes oscillant rapidement :

$$\begin{aligned} 2i\dot{\alpha} &= -\omega_1 \beta e^{i(\omega - \omega_0)t} \\ 2i\dot{\beta} &= -\omega_1 \alpha e^{i(\omega - \omega_0)t} \end{aligned}$$

Cela permet, après calcul complet de trouver la probabilité pour un état de passer de l'état asymétrique à l'état symétrique :

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



Source : Mécanique quantique, Basdevant

### 3.3 Application au MASER

Seulement si il y a du temps. Basdevant p142

### 3.4 Analogie avec la RMN

↗ Basdevant

En RMN, on étudie de le moment cinétique (ou alors le spin) des électrons. Les deux sont reliés par  $\mu = \gamma s$ .  $\gamma$  dépend de l'espèce que l'on considère. On s'intéresse à un électron plongé dans un champ magnétique  $B_0$  selon lequel le spin s'aligne puis on ajoute un champ magnétique perpendiculaire et oscillant qui va venir couplé les deux polarisations de l'électron.

Tableau comparatif :

|             | MASER  | RMN   |
|-------------|--|---|
| Base        | $( \phi_S\rangle,  \phi_A\rangle)$   | $( +\rangle,  -\rangle)$  |
| Hamiltonien | $\begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \cos(\omega t) \\ -\eta \cos(\omega t) & E_0 + A \end{pmatrix}$   | $-\frac{\gamma g}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}$   |
| Scrodinger  | $i\hbar \dot{a} = (E_0 - A)a - \eta b \cos(\omega t)$<br>$i\hbar \dot{b} = (E_0 + A)b - \eta a \cos(\omega t)$   | $i\dot{a}_+ = \frac{\omega_0}{2} a_+ + \frac{\omega_1}{2} a_- e^{-i\omega t}$<br>$i\dot{a}_- = \frac{\omega_1}{2} a_+ e^{i\omega t} - \frac{\omega_0}{2} a_-$ |
| CDV         | $a(t) = e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} \alpha(t)$ et $b(t) = e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} \beta(t)$  | $b_{\pm}(t) = a_{\pm}(t) e^{\pm i\frac{\omega_0}{2} t}$   |
| Pulsations  | $\omega_0 = \frac{2A}{\hbar}$<br>$\omega_1 = \frac{\eta}{\hbar}$   | $\omega_0 = -\frac{\mu_0 B_0}{\hbar}$<br>$\omega_1 = -\frac{\mu_0 B_1}{\hbar}$  |
| Proba       | $P_{A \to S}(t) \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left( \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \frac{t}{2} \right)$ | $P_{- \to +}(t) \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left( \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \frac{t}{2} \right)$    |

### Questions

- 

### Remarques

-