

IV] Systèmes à 2 niveaux et Applications

Définition: système physique qui possède 2 niveaux d'énergie proches entre eux et éloignés des autres niveaux.

- > on cherche à évaluer l'impact d'interactions internes ou externes négligées jusque là.
- > couplage entre les 2 niveaux.

Espace des fonctions d'onde : $\dim = 2$

Base : états stationnaires $\{\phi_1, \phi_2\}$

Energies : $E_1, E_2 \rightarrow$ valeurs propres de H_0

H_0 : Hamiltonien non perturbé

$$\text{Schrödinger : } H_0 \phi_1(x) = E_1 \phi_1(x)$$

$$H_0 \phi_2(x) = E_2 \phi_2(x)$$

Notation matricielle :

$$H_0 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & \phi_1 \\ E_2 & \phi_2 \end{pmatrix}$$

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

matrice diagonale

Introduction du couplage :

Energie d'interaction W

opérateur (observable) associé : \hat{W}

\hat{W} contient des éléments non diagonaux non nuls

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & c e^{+i\varphi} \\ c e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} c \in \mathbb{R} \\ \uparrow \\ \text{amplitude} \end{matrix} \quad \begin{matrix} \varphi \in \mathbb{R} \\ \uparrow \\ \text{phase} \end{matrix}$$

\Rightarrow Hamiltonien général du système :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} = \begin{pmatrix} E_1 & c e^{+i\varphi} \\ c e^{-i\varphi} & E_2 \end{pmatrix}$$

\hat{H} : matrice hermitienne \Rightarrow valeurs propres réelles

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{cases} E_1 \phi_1 + c e^{i\varphi} \phi_2 \\ c e^{-i\varphi} \phi_1 + E_2 \phi_2 \end{cases}$$

Conséquences: Les fonctions d'onde ϕ_1 et ϕ_2 ne sont plus stationnaires car la matrice n'est plus diagonale.
 \hookrightarrow remplacer par ψ^+ et ψ^- fonctions propres de \hat{H}
 \rightarrow diagonalisation de \hat{H}

Une mesure de l'énergie donne les valeurs E^+ et E^- associées
 Evolution dans le temps (oscillations quantiques)

À $t=0$, système à l'état $\phi_1(x)$

À l'instant t , probabilité $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ pour avoir le système à l'état $\phi_2(x)$.

- Valeurs propres de \hat{H} :

Expression de E^+ et E^- en fonction de E_1, E_2, c

Equation aux valeurs propres:

$$\det(\hat{H} - \lambda I) = 0$$

$$\Leftrightarrow \begin{vmatrix} E_1 - \lambda & c e^{i\varphi} \\ c e^{-i\varphi} & E_2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \begin{cases} (E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - c^2 = 0 \\ E_1 E_2 - \lambda(E_1 + E_2) + \lambda^2 - c^2 = 0 \\ \lambda^2 - (E_1 + E_2)\lambda + (E_1 E_2 - c^2) = 0 \end{cases}$$

polynôme 2^{ème} degré en λ :

$$\begin{aligned} \Delta &= (E_1 + E_2)^2 - 4E_1 E_2 + 4c^2 \\ &= E_1^2 + E_2^2 + 2E_1 E_2 - 4E_1 E_2 + 4c^2 \\ &= (E_1 - E_2)^2 + 4c^2 > 0 \end{aligned}$$

Energies propres \rightarrow

$$\begin{cases} E^+ = \lambda^+ = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) + \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4c^2} \right] \\ E^- = \lambda^- = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) - \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4c^2} \right] \end{cases}$$

Fonctions propres (stationnaires) admises :

$$\begin{cases} \Psi^+(x) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \phi_1(x) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{+i\frac{\varphi}{2}} \phi_2(x) \\ \Psi^-(x) = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \phi_1(x) + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{+i\frac{\varphi}{2}} \phi_2(x) \end{cases} \quad \tan \theta = \frac{2c}{E_1 - E_2}$$

Exemple : La molécule d'ammoniac NH_3

NH_3 dans l'univers : émission à la fréquence : $\nu = 24 \text{ GHz}$
 Radios - Telescope micro-onde

Système à 2 états :

2 configurations de la molécule



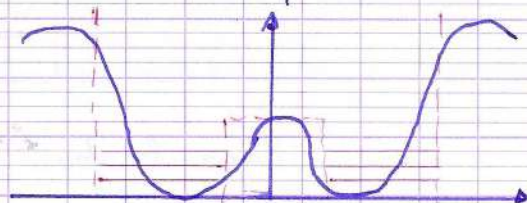
classique 1 config. En MQ : 2 structures inequivalentes.

Le modèle :

NH_3 : particule de masse

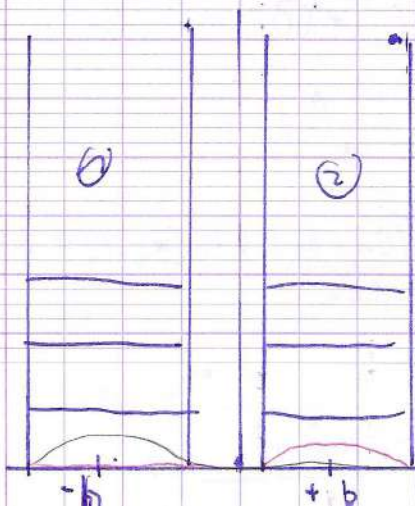
$$m = \frac{m_N \times 3 m_H}{m_N + 3 m_H}$$

2 états



Double puits de potentiel

cf résultats du puits 1D :



$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad \forall x \in \left[b - \frac{a}{2}; b + \frac{a}{2} \right]$$

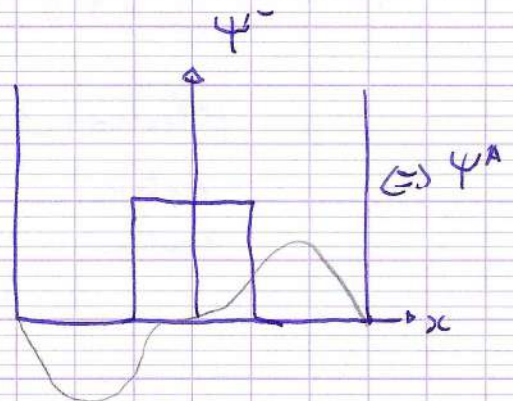
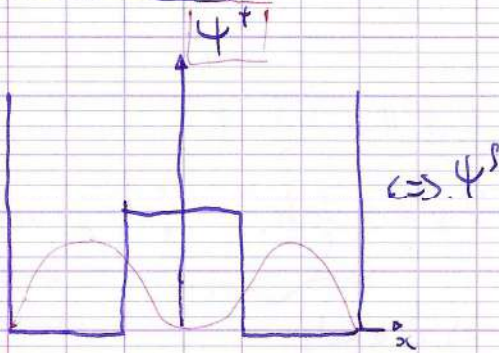
$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \phi_n^+(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(k_n \left(b + \frac{a}{2} - x\right)\right)$$

$$\phi_n^-(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(k_n \left(b + \frac{a}{2} - x\right)\right) \quad \forall -x \in \left[-b + \frac{a}{2}; -b - \frac{a}{2} \right]$$

$n=1$ $\left. \begin{matrix} \phi_0^+(x) \\ \phi_0^-(x) \end{matrix} \right\}$ Etat fondamental :

"psg"

états Ψ^+ et Ψ^- :

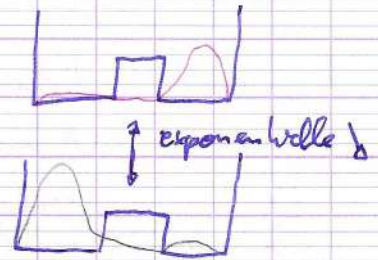


Inversion de la molécule par effet tunnel:

2 états (classiques) non stationnaires

$$\Psi^D = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi^S + \Psi^A) \rightarrow \text{config droite}$$

$$\Psi^G = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi^S - \Psi^A) \rightarrow \text{config gauche}$$



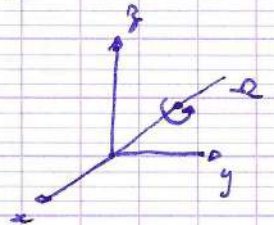
probab d'obtenir Ψ^S lors d'une mesure: $(\frac{1}{\sqrt{2}})^2 = 50\%$
Le système oscille entre Ψ^D et Ψ^G du cours du temps.

V Le SPIN 1/2

Définition: Moment angulaire intrinsèque d'une particule quantique.

Analogie classique: toupie

Quantités vectorielle: $\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$



Règles de quantification du spin:

$$\|\vec{\sigma}\| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad \text{avec } s = \frac{p}{2} \quad p = 1, 2, 3, \dots \quad m_s \in [-s; +s]$$

$$\sigma_z = m_s \hbar$$

Bosons et Fermions: particule de spin entier \rightarrow bosons
 $p = 0, 2, 4, 6, 8, \dots$
 proton $s = 0$
 particule α (noyau de l'hélium) $s = 1$
 $2p + 2m$

• particule de spin demi-entier \rightarrow Fermions
 $p = 1, 3, 5, 7 \dots$

(Électron : $p = 1 \rightarrow \|\vec{\sigma}\| = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$)

proton
neutron

$\sigma_z = +\frac{1}{2} \hbar ; -\frac{1}{2} \hbar$ \rightarrow résultats d'une mesure de la composante z du spin de l'e

\Rightarrow 2 états

$|+\rangle$ et $|-\rangle$

$\Psi_{\sigma}^{+}(x,t)$ $\Psi_{\sigma}^{-}(x,t)$

Lien entre moment angulaire et moment magnétique.
 A une particule en rotation correspond un moment magnétique proportionnel au moment angulaire

$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$

$\vec{L} = m_e v r \vec{u}$

\Rightarrow boucle de courant:

moment magnétique

$\vec{\mu} = I \int_A \vec{u}$
 courant surface de la boucle

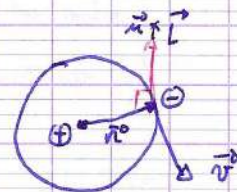
$I = \frac{-e v}{2 \pi r}$ $S = \pi r^2$

$\Rightarrow \vec{\mu} = \gamma_0 \vec{L}$ avec $\gamma_0 = \frac{-e}{2 m_e}$

γ_0 : rapport gyromagnétique
 indépendant de r et v

conséquence:

$\vec{\mu}$ précesse autour de l'axe de \vec{B} (comme)

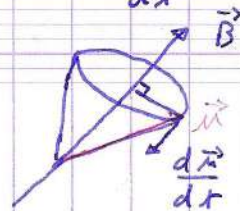


Interact. entre $\vec{\mu}$ et champ magnétique \vec{B} externe.

Energie magnétique $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$
 moment de torsion $\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}$

Evolution dans le temps $\vec{\mu}(t)$
 donnée par théorème du moment cinétique $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Gamma}$

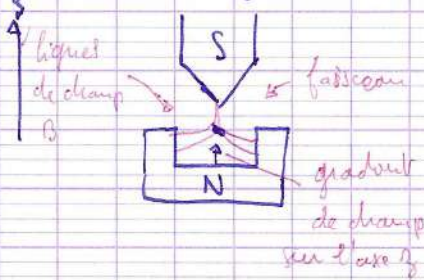
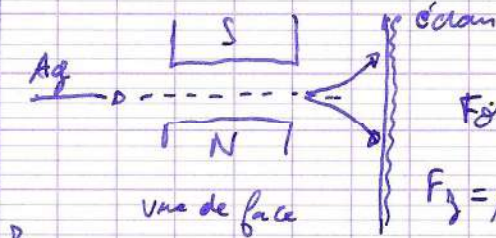
$\Rightarrow \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma_0 \vec{B} \wedge \vec{\mu}$



\Rightarrow mesure de σ_y
 $m_{spin} = \frac{e}{me} \frac{\hbar}{2} = \gamma \hbar$

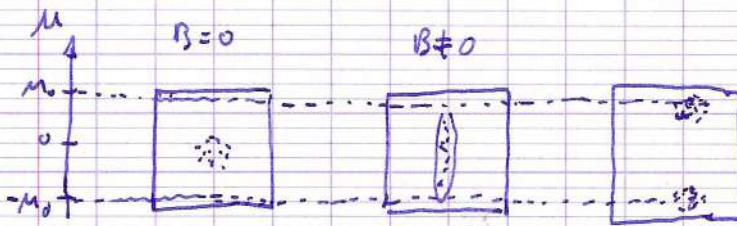
Moment magnétique de spin

Manifestation expérimentale du spin
 Expérience de Stern et Gerlach (1928)



Force appliquée:
 $F_z = \mu_z (T) \times \frac{dB_z}{dz}$
 ↑ gradient de champ

Résultats:



Oral:

Partie II : PPT

La décrit une expérience (calcul rapide)

Concepts

fonction d'onde (expression)

équation de Schrödinger (états stationnaires)

barrière de potentiel (puits)

propa de transverse ondes et transverse

Résonances

Ex NH3 - autres exo