LU3PY101
Physique Quantique 1
2023-2024

TD10 – Résonance magnétique nucléaire – Corrigé –

1 Résonance magnétique nucléaire

La RMN est une technique puissante qui permet de sonder la matière. De sa découverte et son observation en 1938 au développement de techniques de mise en œuvre par plusieurs scientifiques ont obtenus le prix Nobel dont Isidor Rabi, Felix Bloch, Edward Purcell, Richard Ernst, Kurt Wüthrich, Paul Lauterbur et Peter Mansfield. L'application la plus connue du grand public est l'imagerie du corps humain (IRM), mais il y a en fait de nombreuses autres applications : informatique quantique, géophysique, biologie structurale, chimie organique...
On considère une particule de charge électrique nulle et de spin 1/2 soumise à un champ magnétique statique B_0 suivant la direction $\vec{u}_z$ ainsi qu'à un champ magnétique $B_1\cos(\omega t)\vec{u}_x + B_1\sin(\omega t)\vec{u}_y$, oscillant dans le plan xOy. On note γ le rapport gyromagnétique.

1. Quelle relation lie le moment magnétique $\widehat{\vec{\mathcal{M}}}$ et le spin $\widehat{\vec{S}}$ de la particule ?

> **Solution:** Ils ont proportionnels, le coefficient de proportionnalité étant le rapport gyromagnétique : $\hat{\vec{\mathcal{M}}} = \gamma\hat{\vec{S}}$.

2. Exprimer l'hamiltonien d'interaction $\widehat{H}$ entre la particule et le champ magnétique, en fonction des composantes du spin.

> **Solution:** $\widehat{H} = -\hat{\vec{\mathcal{M}}}\cdot\vec{B} = -\gamma\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B} = -\gamma\left(B_0\widehat{S}_z + B_1\cos(\omega t)\widehat{S}_x + B_1\sin(\omega t)\widehat{S}_y\right)$

Dans la suite on introduira les fréquences angulaires $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$.

3. Quelle est la matrice de l'hamiltonien dans la base $\mathcal{B}_z \equiv \{|+\rangle, |-\rangle\}$ des états propres de $\widehat{S}_z$?

> **Solution:** $\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\widehat{\sigma}_z + \frac{\hbar\omega_1}{2}\left(\cos\omega t\ \widehat{\sigma}_x + \sin\omega t\ \widehat{\sigma}_y\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t}\\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0\end{pmatrix}$

On suppose dans un premier temps que $B_1 = 0$.

4. Quels sont les états stationnaires du système ? Expliquer comment s'y prendre pour exercer une force sur les atomes en utilisant le champ magnétique.

Solution: L'hamiltonien se simplifie en $\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\widehat{\sigma}_z = \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$. Il n'y a plus de dépendance temporelle, on retrouve l'hamiltonien diagonalisé de la molécule d'ammoniac en présence d'un champ électrique statique, sauf qu'ici le paramètre qui fait varier ω_0 est un champ magnétique statique. On peut donc exercer une force sur les atomes en appliquant des gradient de champ magnétique, et préparer certains états de spin, ce qui est le principe du Stern et Gerlach. Dans le cours sur la molécule d'ammoniac, nous avons vu comment, de manière analogue un gradient de champ électrostatique permettait de préparer des molécule dans les états symétriques et anti-symétriques. Il faut se souvenir qu'une variation spatiale des niveaux d'énergie (une variation des niveaux d'énergie lorsque l'atome se déplace dans l'espace) correspond à une force. Si les niveaux d'énergie ne varient pas de la même manière en présence du champ, alors la force ressentie par l'atome est différente suivant qu'il est dans un état ou un autre.

On suppose maintenant que $B_1 \neq 0$. On décompose l'état du système à un instant t sur la base $\mathcal{B}_z$: $|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|+\rangle + \beta(t)|-\rangle$.

5. Donner les équations différentielles d'évolution des coefficients $\alpha(t)$ et $\beta(t)$.

Solution: L'équation de Schrödinger dans la base $\mathcal{B}_z$ s'écrit

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t}\\\omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}.$$

Le système d'équations différentielle du premier ordre couplées est donc

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

Pour s'affranchir de la dépendance temporelle du hamiltonien, on passe ensuite dans le référentiel tournant à ω en effectuant le changement de variable

$$\begin{aligned}\gamma(t) &= \alpha(t)e^{i\omega t/2}\\\delta(t) &= \beta(t)e^{-i\omega t/2}\end{aligned}$$

6. Quel est alors le système d'équations différentielles vérifié par $\gamma(t)$ et $\delta(t)$?

Solution: On a

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= \gamma(t)e^{-i\omega t/2}\\\beta(t) &= \delta(t)e^{i\omega t/2}\end{aligned} \quad\Longrightarrow\quad \begin{aligned}\dot{\alpha} &= \left(\dot{\gamma} - i\omega\gamma/2\right)e^{-i\omega t/2}\\\dot{\beta} &= \left(\dot{\delta} + i\omega\delta/2\right)e^{i\omega t/2}.\end{aligned}$$

En substituant dans le système d'équations de la question précédente, les exponentielles se compensent, et l'on obtient

$$\begin{aligned} 2i\dot{\gamma} &= -\left(\omega - \omega_0\right)\gamma + \omega_1 \delta \\ 2i\dot{\delta} &= \omega_1 \gamma + \left(\omega - \omega_0\right)\delta \end{aligned}$$

7. Quel est l'hamiltonien $\widehat{\mathcal{H}}$ décrivant l'évolution du système dans le référentiel tournant ?

Solution: On peut écrire le système d'équation de la question précédente sous forme matricielle

$$2i\begin{pmatrix}\dot{\gamma}\\ \dot{\delta}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\left(\omega-\omega_0\right) & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega-\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma\\ \delta\end{pmatrix}.$$

En faisant apparaitre plus explicitement l'équation de Schrödinger, on obtient

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\gamma\\ \delta\end{pmatrix} = \widehat{\mathcal{H}}\begin{pmatrix}\gamma\\ \delta\end{pmatrix},$$

où

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-\left(\omega-\omega_0\right) & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega-\omega_0\end{pmatrix}$$

est l'hamiltonien dans le référentiel tournant à ω. On remarque qu'il ne dépend pas du temps. Ce changement de référentiel nous a donc permis de nous affranchir de la dépendance temporelle du hamiltonien et de nous ramener à un problème que l'on sait résoudre, en utilisant la méthode habituelle.

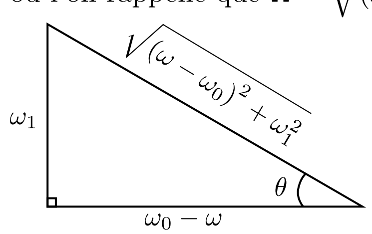
On introduit la fréquence angulaire $\Omega = \sqrt{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$, et le paramètre θ, tel que $\tan\theta = \frac{\omega_1}{\omega_0-\omega}$.

8. Déterminer les énergies propres $E_\pm$, ainsi que les vecteurs propres $\{|+\rangle_{\mathrm{rt}}, |-\rangle_{\mathrm{rt}}\}$, associés (« rt » signifiant *référentiel tournant*).

Solution: On remarque que

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar\Omega}{2}\begin{pmatrix}\frac{\omega_0-\omega}{\Omega} & \frac{\omega_1}{\Omega} \\ \frac{\omega_1}{\Omega} & -\frac{\omega_0-\omega}{\Omega}\end{pmatrix},$$

où l'on rappelle que $\Omega = \sqrt{\left(\omega-\omega_0\right)^2+\omega_1^2}$. Si l'on considère le triangle rectangle suivant :



d'hypoténuse Ω et d'angle θ tel que $\tan\theta = \frac{\omega_1}{\omega_0-\omega}$, on a

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{\omega_0-\omega}{\Omega} \\ \sin\theta &= \frac{\omega_1}{\Omega}. \end{aligned}$$

Ceci permet de récrire l'hamiltonien

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar\Omega}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}.$$

C'est une matrice orthogonale réelle représentant une transformation géométrique à 2D (notez qu'il ne s'agit pas d'une matrice de rotation). On sait alors que ses valeurs propres valent ± 1. Les valeurs propres de $\widehat{\mathcal{H}}$ sont donc $\pm\frac{\hbar\Omega}{2}$.
Nous pouvons remarquer que la matrice obtenue a par ailleurs déjà été diagonalisée dans la partie 1. Le cas présent est le cas particulier où $\phi = 0$. Les vecteurs propres sont donc

$$|+\rangle_{\mathrm{rt}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad |-\rangle_{\mathrm{rt}} = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Remarque : Ici nous avons fait l'hypothèse $\omega_0 > \omega$ pour simplifier les notations. Si $\omega_0 < \omega$, il faut inverser les signes sur la diagonale de la matrice, mais le résultat est inchangé.

9. Donner l'expression générale de l'état $|\Psi(t)\rangle_{\mathrm{rt}}$ du système à un instant t, dans la base $\{|+\rangle_{\mathrm{rt}}, |-\rangle_{\mathrm{rt}}\}$.

Solution: $|\Psi(t)\rangle_{\mathrm{rt}} = c_+ e^{-i\Omega t/2}|+\rangle_{\mathrm{rt}} + c_- e^{i\Omega t/2}|-\rangle_{\mathrm{rt}}$, où c_+ et c_- sont des nombres complexes déterminés par les conditions initiales.

Supposons que le système soit initialement dans l'état $|+\rangle$.

10. Que valent $\gamma(0)$ et $\delta(0)$? En déduire l'expression de l'état $|\Psi(t)\rangle_{\mathrm{rt}}$ du système à un instant t, dans la base $\{|+\rangle_{\mathrm{rt}}, |-\rangle_{\mathrm{rt}}\}$

Solution: Le système étant initialement dans l'état $|+\rangle$, on a $\alpha(0) = 1$ et $\beta(0) = 0$, d'où $\gamma(0) = 1$ et $\delta(0) = 0$. On applique ensuite le changement de base entre $\{|+\rangle_{\mathrm{rt}}, |-\rangle_{\mathrm{rt}}\}$ et $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

On a donc $|\Psi(t)\rangle_{\mathrm{rt}} = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2}|+\rangle_{\mathrm{rt}} + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\Omega t/2}|-\rangle_{\mathrm{rt}}$

11. Exprimer le résultat de la question précédente dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Solution: On applique la matrice de passage à $|\Psi(t)\rangle_{\mathrm{rt}}$:

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\Omega t/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2} + \sin^2\frac{\theta}{2} e^{i\Omega t/2} \\ -i\sin\theta\sin(\Omega t/2) \end{pmatrix}$$

12. Sortir du référentiel tournant à ω et exprimer la solution pour $|\Psi(t)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ (trouver $\alpha(t)$ et $\beta(t)$).

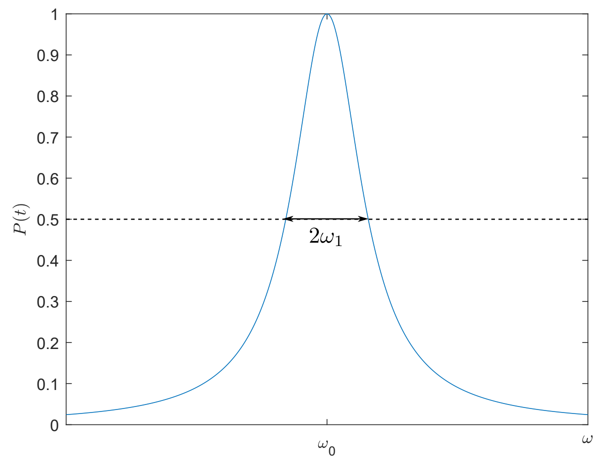
Solution: $|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \left(\cos^2\frac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2} + \sin^2\frac{\theta}{2} e^{i\Omega t/2}\right) e^{-i\omega t/2} \\ -i\sin\theta\sin(\Omega t/2) e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$, le coefficient $\alpha(t)$ étant la première composante et $\beta(t)$ la seconde.

13. Quelle est la probabilité $P(t)$ de mesurer le système dans l'état $|-\rangle$ au cours du temps en fonction de ω_1 et Ω ?

Solution: On a $P(t) = |\langle -|\Psi(t)\rangle|^2 = |\beta(t)|^2 = \sin^2\theta \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$

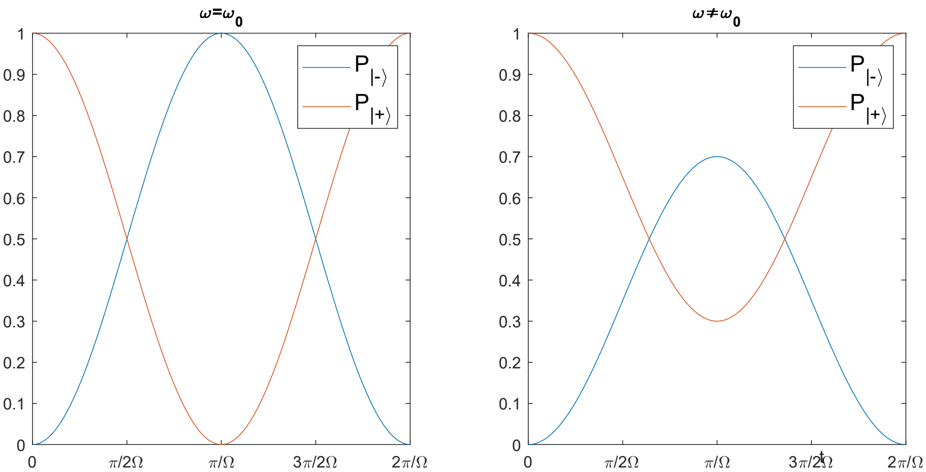
14. Tracer l'enveloppe de $P(t)$ en fonction de ω. Comment s'appelle cette fonction ?

Solution: L'enveloppe de $P(t)$ est la fonction $\frac{\omega_1^2}{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$. Il s'agit d'une fonction lorentzienne centrée en ω_0, de hauteur 1 et de largeur à mi-hauteur $2\omega_1$.



15. Quelle fréquence ω faut-il utiliser pour que le système oscille périodiquement entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$? Comment se nomment ces oscillations ?

Solution: Il faut exciter le système à résonance : $\omega = \omega_0$. Sinon le système n'atteint jamais l'état $|-\rangle$ car le préfacteur $(\omega_1/\Omega)^2$ ne vaut jamais 1. Sur la figure on a représenté le cas résonant à gauche et non résonant à droite. La courbe rouge est la probabilité d'être projeté dans l'état $|+\rangle$ et la courbe bleue celle d'être projeté dans l'état $|-\rangle$ lors de la mesure.



Ces oscillations se nomment « oscillations de Rabi ».

16. Combien de temps faut-il au système pour passer de l'état $|+\rangle$ à l'état $|-\rangle$.

Solution: $T = \pi/\Omega$. On voit qu'on peut ajuster ce temps en changeant la force de l'interaction (en tournant un bouton dans la salle d'expérience), car Ω dépend de ω_1.