MÉCANIQUE QUANTIQUE

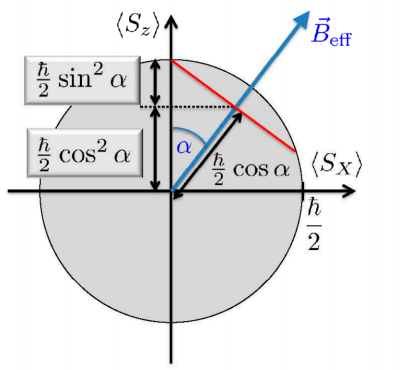
COURS 11 – THÉORIE GÉNÉRALE DU MOMENT CINÉTIQUE

QUENTIN GLORIEUX

3P001 – UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

RÉSONANCE MAGNÉTIQUE NUCLÉAIRE

GÉOMÉTRIE DANS LA SPHERE DE BLOCH



$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\cos^2\alpha + \frac{\hbar}{2}\sin^2\alpha\cos\Omega t$$

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \frac{\Omega}{\gamma}\left|\begin{array}{l}\sin\alpha\\ 0\\ \cos\alpha\end{array}\right.$$

$$\sin\alpha = \frac{|\omega_1|}{\Omega}$$

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \left|\begin{array}{l}-\omega_1/\gamma\\ 0\\ -(\omega_0-\omega)/\gamma\end{array}\right.$$

$$||\vec{B}_{\text{eff}}|| = |\Omega/\gamma|$$

$$\Omega = \sqrt{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$$

➡ Précession de Larmor autour de $\vec{B}_{\text{eff}}$ à la fréquence Ω, appelée **fréquence de Rabi**.

OSCILLATIONS DE RABI

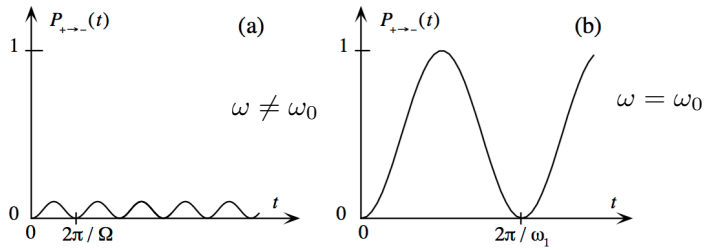
On a vu : $\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\left(1-\sin^2\alpha\,(1-\cos\Omega t)\right)$

$$\sin\alpha = \frac{|\omega_1|}{\Omega}$$

Or (cf quizz) : $\mathcal{P}_-(t) = \frac{1}{2} - \frac{\langle S_z \rangle}{\hbar}$

$$\Omega = \sqrt{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$$

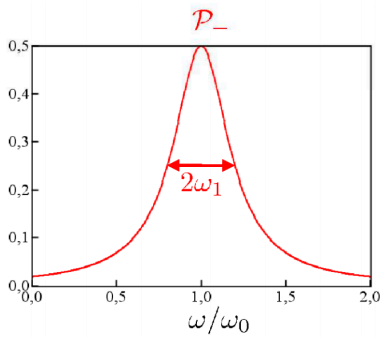
On a donc $\mathcal{P}_-(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega t/2$

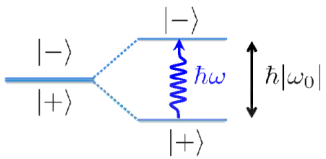


SPECTROSCOPIE PAR RMN

On a vu : $\mathcal{P}_-(t) = \dfrac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2 \Omega t/2$ $\qquad \Omega = \sqrt{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$

En moyenne temporelle : $\mathcal{P} = \overline{\mathcal{P}_-(t)} = \dfrac{1}{2}\dfrac{\omega_1^2}{(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2}$



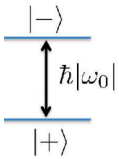


APPLICATIONS DE LA RÉSONANCE MAGNÉTIQUE NUCLÉAIRE

DEMONSTRATION EXPERIMENTALE

- I. Rabi (Nobel 1944)
  Préparation et détection de l'état de spin à l'aide d'un appareil de Stern et Gerlach.

Rabi 44 – Ramsey 89 – Wineland 2012 /Kleppner – Phillips 97



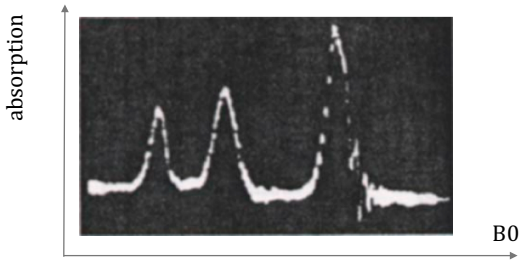
- F. Bloch & E. Purcell (Nobel 1952)
  RMN en phase condensée
  - Pas de préparation des atomes : on utilise l'équilibre thermique

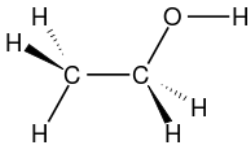
    ex : B0=1.4T, $\frac{|\omega_0|}{2\pi} = 60$ MHz : $\dfrac{\Pi_-}{\Pi_+} = \exp\left(-\dfrac{\hbar|\omega_0|}{k_B T}\right) \approx 1 - 10^{-5}$
  - Détection de l'absorption en fonction de B0 (ou de omega)

DÉPLACEMENT CHIMIQUE

Un des intérets principaux de la RMN est de pouvoir identifier la structure chimique de molécules.

La RMN permet l'identification des protons : les atomes d'hydrogènes dans leur environnement électronique.





Ecrantage du champ par l'environnement : déplacement de la résonance d'une valeur relative de 10^{-6}. C'est une caractéristique de la molécule !

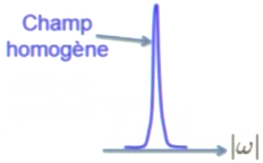
IMAGERIE PAR RÉSONANCE MAGNÉTIQUE (IRM)

P. Luterbur et P. Mansfield (Nobel médecine 2003)

- Pour imager il faut introduire une dépendance spatiale.
  - On ajoute un champ magnétique inhomogène (et constant) au champ B_0. Ce champ est un gradient de champ controlé par des nouvelles bobines.
  - Par exemple :

$$B_z(\vec{r}) = B_0 + \vec{r}\cdot\vec{\nabla}B_z$$
$$= B_0 + x\frac{\partial B_z}{\partial x}$$

pour un gradient selon x.

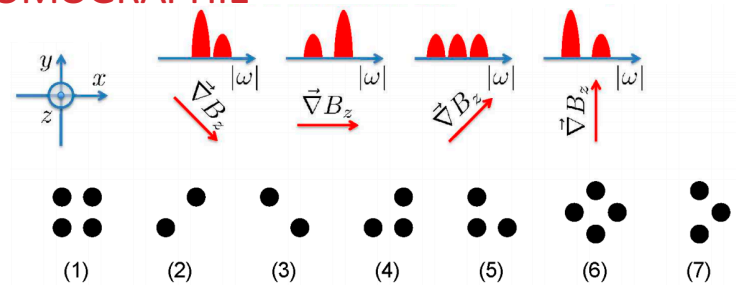


  - Condition de résonance :

$$|\omega| = \gamma B_z = \gamma B_0 + x\gamma\frac{\partial dB_z}{\partial dx}$$

Relation bijective : $|\omega|$ et x !

TOMOGRAPHIE



1.
2.
3.
4.
5.
6.
7.

THÉORIE DU MOMENT CINÉTIQUE

- Observable moment cinétique
- Invariance et symétries
- Etats propres du moment cinétiques
- Moment cinétique intrinsèque

DÉFINITION DU MOMENT CINÉTIQUE

Une rotation d'un angle α autour de z dans la sphère de Bloch peut s'écrire à l'aide de $\hat{S}_z$:

$$\hat{R}_\alpha = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = \exp\left(-i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{S}_z\right)$$

On généralise à une rotation autour de l'axe z dans l'espace cartésien :

$$\hat{R}_{z,\alpha} = \exp\left(-i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{J}_z\right)$$

On note $\hat{J}_z$ la projection de l'observable moment cinétique selon z.

Pour une rotation infinitésimale $d\alpha$, on a : $\hat{R}_{z,d\alpha} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}d\alpha\hat{J}_z$

On dit que le moment cinétique est le générateur infinitésimal du groupe des rotations : le groupe SO(3).

RELATIONS DE COMMUTATION

On peut alors définir l'opérateur moment cinétique : $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$

Relations de commutations se déduisent des propriétés du groupe SO(3) :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \qquad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x \qquad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$$

C'est un vecteur dont on ne peut pas mesurer simultanément les 3 composantes !

Par analogie avec le spin on notera : $\hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar\hat{\vec{J}}$

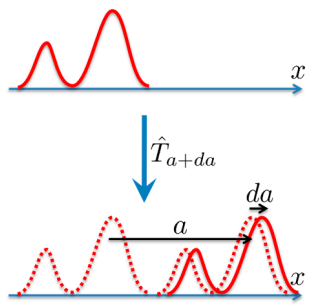
$$\left| \begin{array}{c} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \\ \hat{J}_z \end{array} \right. \times \left| \begin{array}{c} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \\ \hat{J}_z \end{array} \right. = i\hbar \left| \begin{array}{c} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \\ \hat{J}_z \end{array} \right.$$

REMARQUE SUR LES TRANSLATIONS

De façon analogue on peut montrer que le groupe des translations a pour générateur infinitésimal : l'opérateur impulsion.

$$\hat{T}_{x,da} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} da\, \hat{p}_x$$

$$\hat{T}_{x,a} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x a\right)$$



$$\hat{T}_{a+da} = \hat{T}_{da}\hat{T}_a$$

$$\hat{T}_a + da\frac{\partial \hat{T}_a}{\partial a} = \hat{T}_a - \frac{i}{\hbar} da\, \hat{p}_x \hat{T}_a$$

$$\frac{\partial \hat{T}_a}{\partial a} = -\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x \hat{T}_a$$

$$\boxed{\hat{T}_a = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x a\right)}$$

THEOREME DE NOETHER

Les génerateurs infinitésimaux d'un groupe d'invariance sont des constantes du mouvement.

Exemples :

- Pour un système invariant par translation le Hamiltonien commute avec la translation infinitésimale.
  Donc le Hamiltonien commute avec l'impulsion.
  D'après le théorème d'Ehrenfest l'impulsion est une constante du mouvement, c'est le principe d'inertie

- Pour un système invariant par rotation le Hamiltonien commute avec la rotation infinitésimale.
  Donc le Hamiltonien commute avec le moment cinétique.
  D'après le théorème d'Ehrenfest le moment cinétique est une constante du mouvement.

OBSERVABLE J²

On définit $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$

Quelle est la relation de commutation $[\hat{J}_z, \hat{J}^2]$?

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_x^2\right] = \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right]\hat{J}_x + \hat{J}_x\left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_x i\hbar\hat{J}_y$$

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y^2\right] = \left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right]\hat{J}_y + \hat{J}_y\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right] = -i\hbar\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y i\hbar\hat{J}_x$$

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_z^2\right] = 0$$

Donc $[\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0$

Bien sur : $[\hat{J}_x, \hat{J}^2] = 0$ et $[\hat{J}_y, \hat{J}^2] = 0$

On peut donc connaitre simultanément une des composantes cartésiennes de J et J^2

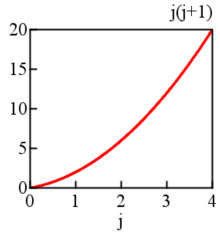
J_z, J^2 et H commutent : on peut chercher une base propre commune.

VALEURS PROPRES DE J^2 ET J_Z

Les valeurs propres de J^2 sont positives ou nulles :

$$\langle\psi|\hat{J}^2|\psi\rangle = \sum_{\alpha=x,y,z} \langle\psi|\hat{J}_\alpha\hat{J}_\alpha|\psi\rangle = \sum_{\alpha=x,y,z} ||\hat{J}_\alpha|\psi\rangle||^2 \geq 0$$

On décide de les noter : $j(j+1)\hbar^2$



On a donc : $\hat{J}^2|\psi\rangle = j(j+1)\hbar^2|\psi\rangle$

et $\hat{J}_z|\psi\rangle = m\hbar|\psi\rangle$

On peut donc définir un espace propre commun à J^2 et J_z associé aux valeurs propres respectives $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$

On va le noter par les indices j et m : $|\psi\rangle = |j,m\rangle$

OPÉRATEURS J_+ ET J_-

On définit $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$

Calculer le commutateur $[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm]$ et $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm]$

$$\begin{aligned}[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_y \pm i(-i\hbar\hat{J}_x) \\ &= \pm\hbar\hat{J}_\pm \quad .\end{aligned}$$

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0 \quad \text{et} \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

Pour la suite du cours nous allons avoir besoin de $\hat{J}_-\hat{J}_+$

$$\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm = (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar\hat{J}_z$$

On trouve : $\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z - \hbar\hat{I})$

et : $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z + \hbar\hat{I})$

ACTION DES OPÉRATEURS J_+ ET J_-

On applique l'opérateur $\hat{J}_+$ sur un vecteur propre commun de J^2 et J_z. Ce nouveau vecteur $\hat{J}_+|j,m\rangle$ est il un vecteur propre de J^2 et J_z ?

Calculez $\hat{J}^2\hat{J}_+|j,m\rangle$ et $\hat{J}_z\hat{J}_+|j,m\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{J}^2\hat{J}_\pm|j,m\rangle &= \hat{J}_\pm\hat{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\hat{J}_\pm|j,m\rangle \\ \hat{J}_z\hat{J}_\pm|j,m\rangle &= (\hat{J}_\pm\hat{J}_z \pm \hbar\hat{J}_\pm)|j,m\rangle = (m\pm1)\hbar\hat{J}_\pm|j,m\rangle \ .\end{aligned}$$

- Le vecteur $\hat{J}_+|j,m\rangle$ est un vecteur propre de de J^2 et J_z associé aux valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $(m+1)\hbar$, ou le vecteur nul
- Le vecteur $\hat{J}_-|j,m\rangle$ est un vecteur propre de de J^2 et J_z associé aux valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $(m-1)\hbar$, ou le vecteur nul

CONDITIONS SUR LES VALEURS PROPRES

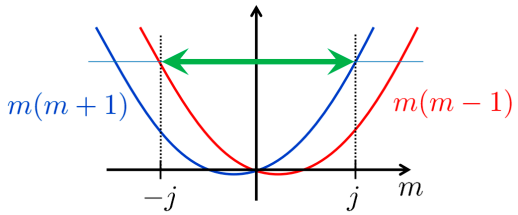
Calculons la norme de $\hat{J}_\pm|j,m\rangle$

$$\|\hat{J}_\pm|j,m\rangle\|^2 = \langle j,m|\hat{J}_\pm^\dagger\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \langle j,m|\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm|j,m\rangle$$

$$\|\hat{J}_\pm|j,m\rangle\|^2 = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2 = (j(j+1) - m(m\pm1))\hbar^2$$

On en déduit une condition sur j pour que cette quantité soit positive.

En effet les racines de $m(m+1) = j(j+1)$ sont m=j et m=-j-1



$\Rightarrow -j-1 \leq m \leq j$

$\Rightarrow -j \leq m \leq j+1$

$$-j \leq m \leq j$$

VALEURS AUTORISÉES POUR J ET M

On utilise une méthode géométrique semblable à celle utilisée pour l'oscilateur harmonique.

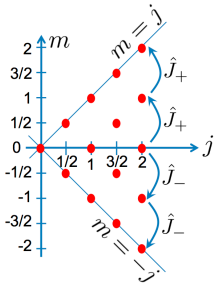
On a :

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{j,m} \qquad \hat{J}_\pm|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{j,m\pm1} \qquad -j \leq m \leq j$$

$$||\hat{J}_\pm|\psi\rangle||^2 = (j(j+1) - m(m\pm1))\,\hbar^2$$

$$||\hat{J}_+|\psi\rangle|| = 0 \;\text{ ssi }\; m = j \qquad ||\hat{J}_-|\psi\rangle|| = 0 \;\text{ ssi }\; m = -j$$

On en déduit :



$$\exists N \in \mathbb{N} \text{ tq } m + N = j$$

$$\exists N' \in \mathbb{N} \text{ tq } m - N' = -j$$

$$j \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots\right\}$$

$$m \in \{-j, -j+1, \ldots, j\}$$

THÉORIE DU MOMENT CINÉTIQUE

- Observable moment cinétique
- Invariance et symétries
- Etats propres du moment cinétiques
- **Moment cinétique intrinsèque**

MOMENT CINÉTIQUE INTRINSÈQUE

Dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{\vec{S}} \times \hat{\vec{S}} = i\hbar\hat{\vec{S}}}$$

$$\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\hat{I}$$

$$|\pm\rangle_z = |j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle$$

$$\hat{S}^2|\pm\rangle_z = j(j+1)\hbar^2|\pm\rangle_z = \frac{3\hbar^2}{4}|\pm\rangle_z \qquad \hat{S}_z|\pm\rangle_z = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_z$$