DYNAMIQUE EN REFERENTIEL TOURNANT :

L'EXEMPLE DE LA RESONANCE MAGNETIQUE

1.- Hamiltonien de spin

On considère une particule de spin $\frac{1}{2}$ placée dans un champ magnétique statique $\vec{B}_0 = B_0\vec{u}_z$ et un champ tournant à la vitesse angulaire constante ω, de faible amplitude b_1

$$\vec{b}_1(t) = b_1\left(\cos\omega t\,\vec{u}_x + \sin\omega t\,\vec{u}_y\right)$$

• En faisant abstraction des variables spatiales, montrer que le Hamiltonien de spin de la particule s'écrit

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2}\left[\omega_L\hat{\sigma}_z + \frac{\omega_1}{2}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t}\hat{\sigma}_-\right)\right]$$

où $\hat{\vec{\sigma}}$ est l'opérateur de spin de Pauli, $\omega_L = -\gamma B_0$ (pulsation de Larmor), $\omega_1 = -\gamma b_1$ et γ le rapport gyromagnétique.

2.- Hamiltonien en représentation d'interaction

On effectue un changement de base définit par la transformation unitaire $\hat{U}(t,0) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}$ et on note $\widetilde{|\Psi(t)\rangle}$ le transformé par $\hat{U}^\dagger$ du vecteur $|\Psi(t)\rangle$ représentant l'état de spin de la particule.

• Montrer que dans cette nouvelle base le Hamiltonien s'écrit $\hat{H}' = -\frac{\hbar}{2}\delta\hat{\sigma}_z + \frac{\hbar\omega_1}{2}\hat{\sigma}_x$ où $\delta = \omega - \omega_L$.

• En déduire que dans cette nouvelle base le spin précesse autour d'un *champ magnétique efficace* constant dont on déterminera l'expression.

• déterminer l'évolution temporelle de l'état de spin $\widetilde{|\Psi(t)\rangle} = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$.

3.- Résonance magnétique

On suppose que le spin est initialement dans l'état $|+\rangle$.

• Calculer la probabilité de basculement du spin au temps t et montrer le caractère résonnant de cette probabilité.

Corrigé

1.- Hamiltonien de spin

Le Hamiltonien de spin s'écrit : $\hat{H}(t) = -\hat{\vec{M}}.\vec{B}(t)$ où $\hat{\vec{M}}$ est l'opérateur moment magnétique $\hat{\vec{M}} = \gamma\hat{\vec{S}} = \gamma\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ et $\vec{B}(t)$ le champ magnétique total $\vec{B}(t) = B_0\vec{u}_z + b_1\left(\cos\omega t\,\vec{u}_x + \sin\omega t\,\vec{u}_y\right)$

γ est le rapport gyromagnétique et $\hat{\vec{\sigma}}$ l'opérateur de spin de Pauli.

Par conséquent : $\hat{H}(t) = -\frac{\hbar}{2}\left[\gamma B_0\hat{\sigma}_z + \gamma b_1\left(\cos\omega t\,\hat{\sigma}_x + \sin\omega t\,\hat{\sigma}_y\right)\right]$

Soit encore en posant : $\omega_L = -\gamma B_0$ (pulsation de Larmor dans le champ $\vec{B}_0$) et $\omega_1 = -\gamma b_1$ (traduisant l'intensité du couplage).

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2}\left[\omega_L\hat{\sigma}_z + \omega_1\underbrace{\left(\cos\omega t\,\hat{\sigma}_x + \sin\omega t\,\hat{\sigma}_y\right)}_{\frac{1}{2}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t}\hat{\sigma}_-\right)}\right]$$

d'où en définitive :

$$\boxed{\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2}\left[\omega_L\hat{\sigma}_z + \frac{\omega_1}{2}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t}\hat{\sigma}_-\right)\right] \quad (1)}$$

$\hat{H}(t)$ est de la forme $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ avec $\begin{cases}\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_L}{2}\hat{\sigma}_z \\ \hat{V}(t) = \frac{\hbar\omega_1}{4}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t}\hat{\sigma}_-\right)\end{cases}$

Comme $b_1 << B_0$, $\hat{V}(t)$ peut être considérée comme une faible perturbation, condition nécessaire pour travailler en **représentation d'interaction** (appelée encore « représentation intermédiaire »).

2.- Hamiltonien en représentation d'interaction

$\hat{V}(t)$ étant une faible perturbation, il est légitime de rechercher les états propres $|\Psi(t)\rangle$ de $\hat{H}(t)$ sous la forme d'un développement suivant les états propres $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ de $\hat{H}_0$.

$$|\Psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle \quad (2)$$

dont l'évolution temporelle est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle \quad (3)$$

La projection de (3) sur les deux vecteurs de la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ fournit un système différentiel de deux équations permettant, *en théorie*, de calculer les coefficients $a_+(t)$ et $a_-(t)$. La

perturbation $\hat{V}$ dépendant du temps, ce système sera à coefficients *non constants.* Pour éviter cette difficulté, effectuons un changement de base défini par la transformation unitaire

$$\hat{U}^{\dagger}(t,0)=e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z} \quad \left(\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{\dagger}\hat{U}=\hat{I}\right) \quad (4)$$

$\hat{U}$ est l'opérateur de rotation d'un spin $\frac{1}{2}$ autour de l'axe Oz, d'un angle ωt (on se souvient que l'opérateur de rotation d'un angle θ autour de l'axe $\vec{n}$ est $\hat{U}=e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{\vec{J}}.\vec{n}}$)

La transformation unitaire $\hat{U}^{\dagger}$ permet donc de se placer dans un référentiel tournant à la vitesse angulaire $-\omega$ autour de l'axe Oz. Le champ tournant $\vec{b}_1(t)$ va donc être immobile pour le spin et apparaître comme un terme constant. Le système différentiel donnant les coefficients du développement de l'état de spin sur la base $\{|+\rangle,|-\rangle\}$ sera à coefficients constants et donc facilement intégrable.

Soit $|\tilde{\Psi}(t)\rangle=\hat{U}^{\dagger}|\Psi(t)\rangle \quad (5)$ le transformé de $|\Psi(t)\rangle$ par $\hat{U}^{\dagger}$

(et donc $|\Psi(t)\rangle=\hat{U}|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ puisque $\hat{U}$ est unitaire).

$(3)\Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}\left(\hat{U}|\tilde{\Psi}(t)\rangle\right)=\hat{H}(t)\left(\hat{U}|\tilde{\Psi}(t)\rangle\right)$, soit en développant la dérivée du premier membre $i\hbar\left(\frac{d\hat{U}}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle+\hat{U}\frac{d}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle\right)=\hat{H}(t)\hat{U}|\tilde{\Psi}(t)\rangle$. En multipliant, à gauche, les deux membres de cette égalité par $\hat{U}^{\dagger}$, on obtient : $i\hbar\hat{U}^{\dagger}\frac{d\hat{U}}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle+i\hbar\underbrace{\hat{U}^{\dagger}\hat{U}}_{=\hat{I}}\frac{d}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle=\hat{U}^{\dagger}\hat{H}(t)\hat{U}|\tilde{\Psi}(t)\rangle$.

Soit encore :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle=\underbrace{\left(\hat{U}^{\dagger}\hat{H}(t)\hat{U}-i\hbar\hat{U}^{\dagger}\frac{d\hat{U}}{dt}\right)}_{=\hat{H}'}|\tilde{\Psi}(t)\rangle \quad (6)$$

Calculons explicitement le terme $-i\hbar\hat{U}^{\dagger}\frac{d\hat{U}}{dt}$

$$-i\hbar\hat{U}^{\dagger}\frac{d\hat{U}}{dt}=-i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\frac{d}{dt}\left(e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\right)=-\frac{\hbar\omega}{2}\hat{\sigma}_z$$

(pour calculer $\frac{d}{dt}\left(e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\right)$ on développe l'exponentielle avant d'effectuer l'opération de dérivation puis on « re-somme » la dérivée du développement en série. Tout se passe finalement comme si $\hat{\sigma}_z$ n'était pas un opérateur)

d'où :

$$\hat{H}'=\hat{U}^{\dagger}\left[\frac{\hbar\omega_L}{2}\hat{\sigma}_z+\frac{\hbar\omega_1}{4}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_{+}+e^{i\omega t}\hat{\sigma}_{-}\right)\right]\hat{U}-\frac{\hbar\omega}{2}\hat{\sigma}_z$$

Comme $\left[\hat{\sigma}_z,\hat{U}\right]=0$ (évident), on peut encore écrire en posant $\delta=\omega-\omega_L$ (« detuning » ou « désaccord spin-champ ») :

$$\hat{H}'=-\frac{\hbar}{2}\delta\hat{\sigma}_z+\frac{\hbar\omega_1}{4}\hat{U}^{\dagger}\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_{+}+e^{i\omega t}\hat{\sigma}_{-}\right)\hat{U}$$

On termine la détermination de $\hat{H}'$ en calculant le transformé de $\left(e^{-i\omega t}\hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t}\hat{\sigma}_-\right)$

Soit : $e^{-i\omega t}\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_+\hat{U} + e^{i\omega t}\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_-\hat{U}$

sachant que dans la base $\{|+\rangle,|-\rangle\}$, $\begin{cases}\hat{\sigma}_+ = \hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_- = \hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}(\hat{\sigma}_+) = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} + i\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{pmatrix} \\ (\hat{\sigma}_-) = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} - i\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 2 & 0\end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_- = 2\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix}0 & 2\\ 2 & 0\end{pmatrix}\end{cases}$

et $\left(\hat{U}\right) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$; $\left(\hat{U}^\dagger\right) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$

Pour obtenir l'expression matricielle $\left(\hat{U}\right)$ de l'opérateur $\hat{U}$ dans la base $\{|+\rangle,|-\rangle\}$ on peut :

- Soit utiliser l'égalité classique $\boxed{e^{i\theta\hat{\vec{\sigma}}.\vec{n}} = \cos\theta\hat{I} + i\hat{\vec{\sigma}}.\vec{n}\sin\theta}$, c'est-à-dire ici

$e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z} = \hat{I}\cos\frac{\omega t}{2} - i\hat{\sigma}_z\sin\frac{\omega t}{2}$, qui s'écrit dans la base $\{|+\rangle,|-\rangle\}$:

$$\left(e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\right) = \begin{pmatrix}\cos\frac{\omega t}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\omega t}{2}\end{pmatrix} - i\sin\frac{\omega t}{2}\underbrace{\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}}_{(\hat{\sigma}_z)} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$$

- Soit utiliser simplement un développement en série de l'exponentielle:

$$\left(e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\right) = \hat{I} - \frac{\omega t}{2}(\hat{\sigma}_z) + \cdots + \frac{(-1)^n}{n!}\left(\frac{\omega t}{2}\right)^n(\hat{\sigma}_z)^n + \cdots$$

Avec : $(\hat{\sigma}_z)^n = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & (-1)^n\end{pmatrix}$

$$\left(e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z}\right) = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - \frac{i\omega t}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + \cdots + \frac{(-1)^n}{n!}\left(\frac{i\omega t}{2}\right)^n\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & (-1)^n\end{pmatrix} + \cdots$$

$$= \begin{pmatrix}\underbrace{1 - \frac{i\omega t}{2} + \cdots + \frac{(-1)^n}{n!}\left(\frac{i\omega t}{2}\right)^n + \cdots}_{e^{-i\frac{\omega t}{2}}} & 0 \\ 0 & \underbrace{1 + \frac{i\omega t}{2} + \cdots + \frac{(-1)^n}{n!}\left(\frac{i\omega t}{2}\right)^n + \cdots}_{e^{i\frac{\omega t}{2}}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$$

Il vient en définitive :

$$e^{-i\omega t}\left(\hat{U}^\dagger\right)(\hat{\sigma}_+)\left(\hat{U}\right) + e^{i\omega t}\left(\hat{U}^\dagger\right)(\hat{\sigma}_-)\left(\hat{U}\right) = 2\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} = 2\hat{\sigma}_x$$

D'où :

$$\boxed{\hat{H}' = -\frac{\hbar}{2}\delta\hat{\sigma}_z + \frac{\hbar\omega_1}{2}\hat{\sigma}_x \quad (7)}$$

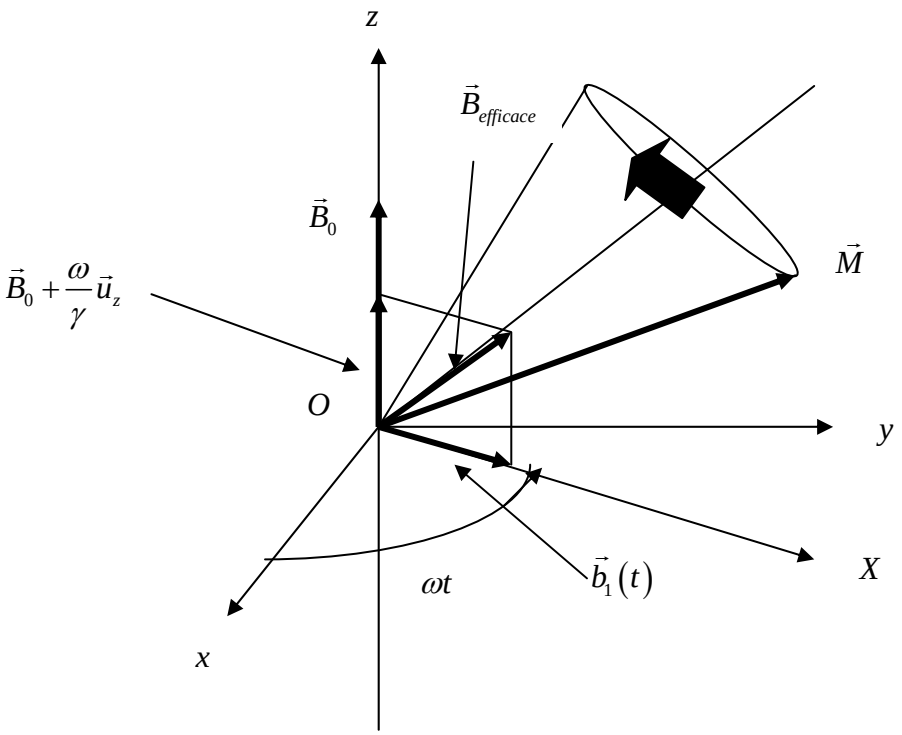
On remarque que $\hat{H}'$ est bien indépendant du temps.
Ce qui, compte tenu du fait que $\omega_L = -\gamma B_0$, $\omega_1 = -\gamma b_1$ et $\delta = \omega - \omega_L$, peut encore s'écrire

$$\hat{H}' = -\gamma\left[\left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma}\right)\hat{S}_z + b_1\hat{S}_x\right] = -\gamma\vec{B}_{eff}.\hat{\vec{S}}$$

Tout se passe comme si dans le référentiel tournant à la vitesse angulaire $-\omega$, le spin était soumis au champ magnétique « efficace » **constant** $\boxed{\vec{B}_{eff} = \left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma}\right)\vec{u}_z + b_1\vec{u}_x}$.

Remarque :

Retrouvons rapidement ce résultat en mécanique classique…….



Définissons le référentiel fixe $R\{Oxyz\}$ et le référentiel tournant lié à $\vec{b}_1(t)$: $R'\{OXYz\}$.

$$\left.\frac{d\vec{S}}{dt}\right|_R = \underbrace{\left.\frac{d\vec{S}}{dt}\right|_{R'} + \vec{\omega}_{(R'/R)} \wedge \vec{S}}_{\text{dérivation vectorielle}} = \underbrace{\overbrace{\gamma\vec{S}}^{\vec{M}} \wedge \left(\vec{B}_0 + \vec{b}_1(t)\right)}_{\text{théorème du moment cinétique}}$$

$$\Rightarrow \left.\frac{d\vec{S}}{dt}\right|_{R'} = \gamma\vec{S} \wedge \left(\underbrace{\vec{B}_0 + \vec{b}_1(t) + \frac{\omega}{\gamma}\vec{u}_z}_{\vec{B}_{efficace}}\right) = \gamma\vec{S} \wedge \vec{B}_{efficace} = -\gamma\vec{B}_{efficace} \wedge \vec{S} = -\vec{\Omega} \wedge \vec{S}$$

Tout se passe dans R' comme si le spin $\vec{S}$ subissait l'action d'un champ unique

$$\boxed{\vec{B}_{efficace} = \left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma}\right)\vec{u}_z + b_1(t)\vec{u}_X}$$

$\vec{B}_{efficace} = \begin{vmatrix} b_1 \\ 0 \\ B_0 + \dfrac{\omega}{\gamma} \end{vmatrix}$. Dans R', la précession rétrograde (à cause du signe – devant Ω) de $\vec{S}$ autour de $\vec{B}_{efficace}$ se fait à la fréquence angulaire (pulsation) $\Omega = \gamma \left\| \vec{B}_{efficace} \right\| = \sqrt{(\omega - \omega_L)^2 + \omega_1^2} = \sqrt{(\delta)^2 + \omega_1^2}$

A la résonance $\omega_L = \omega_0 \Rightarrow \Omega = \omega_1 \Leftrightarrow \vec{B}_{efficace} = \vec{b}_1(t)$

Dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, la matrice représentative du Hamiltonien $\hat{H}'$ s'écrit :

$$\left(\hat{H}'\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\delta & \omega_1 \\ \omega_1 & \delta \end{pmatrix}$$

et $\left|\tilde{\Psi}(t)\right\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$

donc : $i\hbar \dfrac{d}{dt}\left|\tilde{\Psi}(t)\right\rangle = \hat{H}'\left|\tilde{\Psi}(t)\right\rangle \Leftrightarrow i\hbar \begin{pmatrix} \dot{b}_+(t) \\ \dot{b}_-(t) \end{pmatrix} = \dfrac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\delta & \omega_1 \\ \omega_1 & \delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_+(t) \\ b_-(t) \end{pmatrix}$

$$\text{soit : } \begin{cases} \dot{b}_+(t) = \dfrac{i\delta}{2} b_+(t) - \dfrac{i\omega_1}{2} b_-(t) \\ \dot{b}_-(t) = -\dfrac{i\omega_1}{2} b_+(t) - \dfrac{i\delta}{2} b_-(t) \end{cases} \qquad (8)$$

Le système différentiel (8) est à coefficients constants et s'intègre facilement en utilisant les formules de Frazer-Duncan et Collar (cf. Polycopié TII, module : « systèmes à deux niveaux », page 47)

En effet, il est de la forme :

$\{\dot{X}(t)\} = [A]\{X(t)\}$ avec $\{\dot{X}(t)\} = \begin{pmatrix} \dot{b}_+(t) \\ \dot{b}_-(t) \end{pmatrix}$ et $[A] = \dfrac{-i}{2}\begin{pmatrix} -\delta & \omega_1 \\ \omega_1 & \delta \end{pmatrix}$

dont la solution est évidemment $\{X(t)\} = e^{[A]t}\{X(0)\}$

soit en calculant l'exponentielle de matrice grâce aux formules de Frazer-Duncan et Collar :

$\{X(t)\} = \sum_i e^{\lambda_i t}[G_i]\{X(0)\}$ où $[G_i] = \dfrac{\prod_{j \neq i}\left(\lambda_j [I] - [A]\right)}{\prod_{j \neq i}\left(\lambda_j - \lambda_i\right)}$, les λ_i étant les valeurs propres **distinctes** de la matrice $[A]$; soit $\begin{cases} \lambda_1 = \dfrac{i}{2}\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} = \dfrac{i\Omega}{2} \\ \lambda_2 = -\dfrac{i\Omega}{2} \end{cases}$

Où $\boxed{\Omega = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} = \sqrt{(\omega - \omega_L)^2 + \omega_1^2}}$ est la ***pulsation de Rabi « généralisée »***.

La méthode d'intégration est donc particulièrement simple puisqu'il suffit de déterminer les valeurs propres de la matrice carrée $[A]$. La méthode n'est évidemment valable que si ses valeurs propres sont distinctes (ce qui, pour un système à deux niveaux est toujours le cas).
De façon explicite :

$$\begin{cases} [G_1] = \dfrac{-i\dfrac{\Omega}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - \dfrac{i}{2}\begin{pmatrix}-\delta & \omega_1\\ \omega_1 & \delta\end{pmatrix}}{-i\dfrac{\Omega}{2} - i\dfrac{\Omega}{2}} = \dfrac{1}{2\Omega}\begin{pmatrix}\Omega+\delta & -\omega_1\\ -\omega_1 & \Omega-\delta\end{pmatrix} \\ [G_2] = \dfrac{i\dfrac{\Omega}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - \dfrac{i}{2}\begin{pmatrix}-\delta & \omega_1\\ \omega_1 & \delta\end{pmatrix}}{i\dfrac{\Omega}{2} + i\dfrac{\Omega}{2}} = \dfrac{1}{2\Omega}\begin{pmatrix}\Omega-\delta & \omega_1\\ \omega_1 & \Omega+\delta\end{pmatrix} \end{cases}$$

$$\{X(t)\} = \left[\frac{e^{i\frac{\Omega t}{2}}}{2\Omega}\begin{pmatrix}\Omega+\delta & -\omega_1\\ -\omega_1 & \Omega-\delta\end{pmatrix} + \frac{e^{-i\frac{\Omega t}{2}}}{2\Omega}\begin{pmatrix}\Omega-\delta & \omega_1\\ \omega_1 & \Omega+\delta\end{pmatrix}\right]\{X(0)\}$$

$$\boxed{\Rightarrow \begin{cases} b_+(t) = b_+(0)\left[\cos\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) + \dfrac{i\delta}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] + b_-(0)\left[-\dfrac{i\omega_1}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] \\ b_-(t) = b_+(0)\left[-\dfrac{i\omega_1}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] + b_-(0)\left[\cos\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) - \dfrac{i\delta}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] \end{cases}}$$

• Pour ceux que toute nouveauté mathématique rebute, il leur est évidemment loisible d'utiliser les bonnes vieilles méthodes classiques pour intégrer le système différentiel d'équations couplées :

$$\begin{cases} \dot{b}_+(t) = \dfrac{i\delta}{2}b_+(t) - \dfrac{i\omega_1}{2}b_-(t) & (1) \\ \dot{b}_-(t) = -\dfrac{i\omega_1}{2}b_+(t) - \dfrac{i\delta}{2}b_-(t) & (2) \end{cases}$$

On différentie (1) : $\ddot{b}_+(t) = \dfrac{i\delta}{2}\underbrace{\dot{b}_+(t)}_{\downarrow(1)} - \dfrac{i\omega_1}{2}\underbrace{\dot{b}_-(t)}_{\downarrow(2)}$ et on réutilise (1) et (2) comme indiqué :

$$\ddot{b}_+(t) = \frac{i\delta}{2}\left[\frac{i\delta}{2}b_+(t) - \frac{i\omega_1}{2}b_-(t)\right] - \frac{i\omega_1}{2}\left[-\frac{i\omega_1}{2}b_+(t) - \frac{i\delta}{2}b_-(t)\right]$$

$$= -\frac{\delta^2+\omega_1^2}{4}b_+(t) = \left(\frac{i\Omega}{2}\right)^2 b_+(t)$$

$$\Rightarrow \quad b_+(t) = Ae^{\frac{i\Omega}{2}t} + Be^{-\frac{i\Omega}{2}t}$$

On effectue la même opération avec (2) $\rightarrow$ $b_-(t) = Ce^{\frac{i\Omega}{2}t} + De^{-\frac{i\Omega}{2}t}$ et il ne reste plus qu'à s'armer de patience pour déterminer les constantes A, B, C et D en fonction de $b_+(0)$ et $b_-(0)$.

$$\begin{cases} \dot{b}_+(0) = \dfrac{i\delta}{2} b_+(0) - \dfrac{i\omega_1}{2} b_-(0) = \dfrac{i\Omega}{2}(A-B) \\ b_+(0) = A+B \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \dfrac{\delta+\Omega}{2\Omega} b_+(0) - \dfrac{\omega_1}{2\Omega} b_-(0) \\ B = -\dfrac{\delta-\Omega}{2\Omega} b_+(0) + \dfrac{\omega_1}{2\Omega} b_-(0) \end{cases}$$

De même :

$$\begin{cases} \dot{b}_-(0) = -\dfrac{i\omega_1}{2} b_+(0) - \dfrac{i\delta}{2} b_-(0) = \dfrac{i\Omega}{2}(C-D) \\ b_-(0) = C+D \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C = -\dfrac{\omega_1}{2\Omega} b_+(0) + \dfrac{\Omega-\delta}{2\Omega} b_-(0) \\ D = \dfrac{\omega_1}{2\Omega} b_+(0) + \dfrac{\Omega+\delta}{2\Omega} b_-(0) \end{cases}$$

On termine le calcul de $b_+(t)$ et $b_-(t)$ en regroupant les exponentielles pour faire apparaître des fonctions trigonométriques.

$$\begin{cases} b_+(t) = b_+(0)\left[\cos\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) + \dfrac{i\delta}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] + b_-(0)\left[-\dfrac{i\omega_1}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] \\ b_-(t) = b_+(0)\left[-\dfrac{i\omega_1}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] + b_-(0)\left[\cos\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) - \dfrac{i\delta}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right)\right] \end{cases}$$

3.- Résonance magnétique

Supposons que le spin soit initialement dans l'état $|+\rangle$, soit $b_-(0) = 0$ et $b_+(0) = 1$, on trouve alors :

$$\begin{cases} b_+(t) = \cos\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) + \dfrac{i\delta}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) \\ b_-(t) = -\dfrac{i\omega_1}{\Omega}\sin\left(\dfrac{\Omega t}{2}\right) \end{cases}$$

La probabilité qu'une mesure de $\hat{S}_z$ faite au temps t donne le résultat $-\dfrac{\hbar}{2}$ (probabilité de basculement du spin) est :

$$P_{+\to-}(t) = \left|\langle -|\Psi(t)\rangle\right|^2 = |a_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2$$

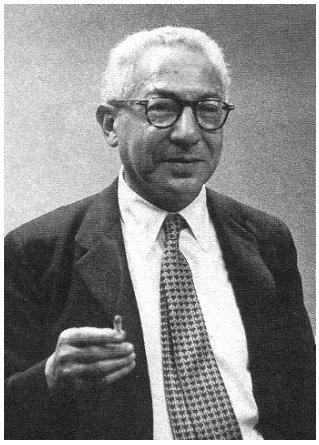
$$\boxed{P_{+\to-}(t) = \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{\omega_1^2}{(\omega-\omega_L)^2+\omega_1^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{(\omega-\omega_L)^2+\omega_1^2}}{2}t\right)}$$

Soit en notation condensée :

$$\boxed{P_{+\to-}(t) = \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{\omega_1^2}{\delta^2+\omega_1^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{\delta^2+\omega_1^2}}{2}t\right)}$$

Où $\delta = \omega - \omega_L$ est le detuning atome-champ.

Cette formule, due à Rabi (prix Nobel 1944), met clairement en évidence le phénomène de résonance recherché.



• Si la fréquence ω du champ tournant est choisie notablement différente de la fréquence ω_L que l'on souhaite mesurer (plus précisément si $|\omega - \omega_L| >> \omega_1$), alors la probabilité que « le spin bascule », c'est-à-dire que l'on mesure $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ est très faible pour tout t.

• Si l'on choisit $\omega = \omega_L$, alors $\Omega = \omega_1$ et la probabilité de basculement du spin est égale à 1 aux temps $t_n = \frac{(2n+1)\pi}{\omega_1}$ (n entier), **même si l'amplitude du champ tournant $\vec{b}_1$ est très faible.**

• Pour $|\omega - \omega_L| \sim \omega_1$, l'amplitude de probabilité oscille avec une amplitude maximale appréciable mais inférieure à 1.

Nous avons tracé sur la figure 1 l'oscillation temporelle de la probabilité $P_{+\to-}(t)$ en dehors de la résonance (a) et à résonance (b). Pour un champ magnétique de 1Tesla, la fréquence de résonance est $\frac{\omega_e}{2\pi} \sim 28\,\text{GHz}$ $(\lambda \sim 1\text{cm})$ pour un électron et $\frac{\omega_N}{2\pi} \sim 42{,}5\ \text{MHz}$ $(\lambda \sim 7\text{m})$ pour un proton. Ces fréquences correspondent à des ondes centimétriques dans le cas électronique et métriques dans le cas nucléaire.

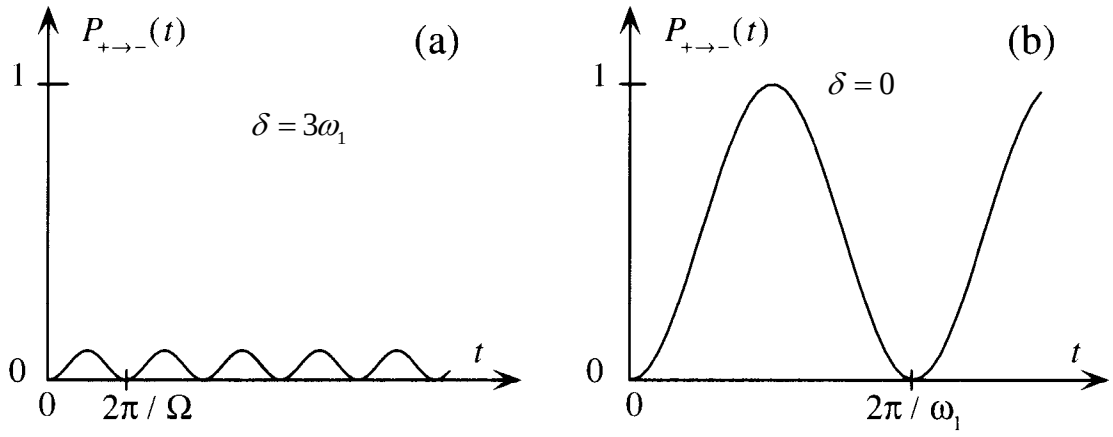
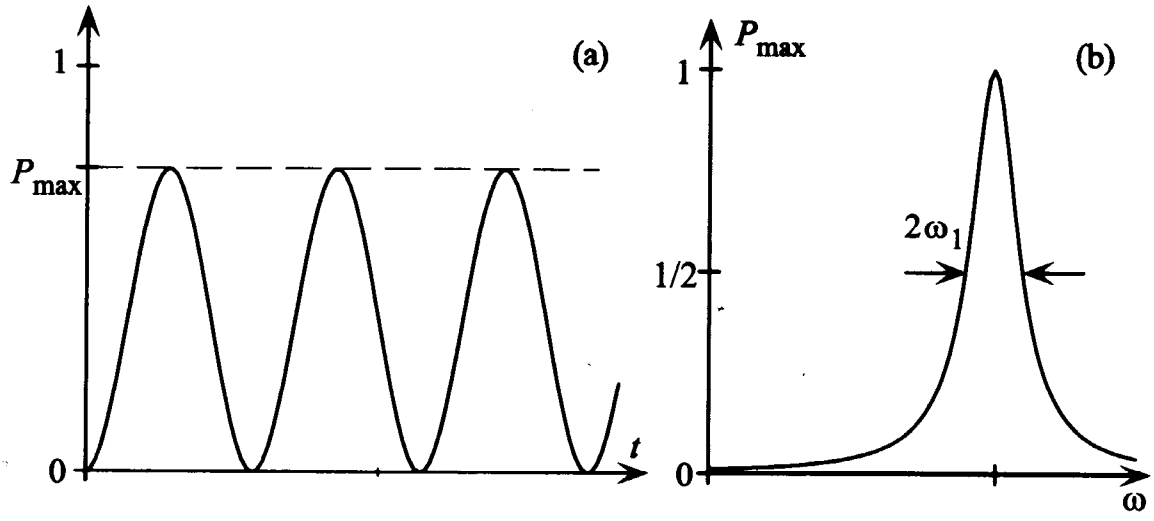


Figure 1

En dehors de la résonance la probabilité maximum de basculement, $P_{+\to-}^{\max} = \dfrac{\omega_1^2}{\left(\omega-\omega_L\right)^2+\omega_1^2}$ est une Lorentzienne de largeur $2\omega_1$, centrée en ω_L, donc d'autant plus étroite que le couplage est faible $\left(\omega_1 = -\gamma b_1\right)$.



(a) $P_{+\to-}(t)$ *(b)* $P_{+\to-}^{\max}(\omega)$ (lorentzienne centrée en $\omega = \omega_L$)