Résonance magnétique d'un spin 1/2 (1)

Examen Phy. Q. I IPhY 2A 2021/22

$$\vec{B} = B_0 \vec{u}_z + B_1 (\cos\omega t \, \vec{u}_x + \sin\omega t \, \vec{u}_y)$$

$$H(t) = -\vec{M} \cdot \vec{B}(t)$$

1.1 Soit $\mathcal{C}$ la base de codiagonalisation de S_z et $\vec{S}^2$

$$H = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} = -\gamma B_0 S_z$$

avec $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_{\mathcal{C}}$

donc $H = -\gamma B_0 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

1.2 $H(t) = -\gamma (B_0 S_z + B_1 \cos\omega t \, S_x + B_1 \sin\omega t \, S_y)$

$$= -\gamma B_0 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \gamma B_1 \begin{pmatrix} 0 & \cos\omega t - i\sin\omega t \\ \cos\omega t + i \sin\omega t & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

$$= -\gamma \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$ avec $\omega_0 = -\gamma B_0$, $\omega_1 = -\gamma B_1$

2

1.3 $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \mathring{a}_+ \\ \mathring{a}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 a_+ + \omega_1 e^{-i\omega t} a_- \\ \omega_1 e^{i\omega t} a_+ - \omega_0 a_- \end{pmatrix}$$

2.1 $R(t) = e^{i\omega t S_z/\hbar} = \sum_n \left(\frac{i\omega t}{2}\sigma_z\right)^n \cdot \frac{1}{n!}$

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

$$= \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

2.2 $|\hat{\psi}(t)\rangle = R(t)|\psi(t)\rangle$

$$= \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+ \cdot e^{i\omega t/2} \\ a_- e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}$$

2.3

$$\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_+ e^{-i\omega t/2} \\ b_- e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathring{a}_+ \\ \mathring{a}_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathring{b}_+ - i\frac{\omega}{2} b_+) e^{-i\omega t/2} \\ (\mathring{b}_- + i\frac{\omega}{2} b_-) e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\hookrightarrow i\hbar \begin{pmatrix} (\mathring{b}_+ - i\frac{\omega}{2} b_+) e^{-i\omega t/2} \\ (\mathring{b}_- + i\frac{\omega}{2} b_-) e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 b_+ e^{-i\omega t/2} + \omega_1 b_- e^{i\omega t/2} \\ \omega_1 b_+ e^{i\omega t/2} - \omega_0 b_- e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow i\hbar \begin{pmatrix} \mathring{b}_+ - i\frac{\omega}{2} b_+ \\ \mathring{b}_- + i\frac{\omega}{2} b_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 b_+ + \omega_1 b_- \\ \omega_1 b_+ - \omega_0 b_- \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \mathring{b}_+ \\ \mathring{b}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} (\omega_0 - \omega) b_+ & + \omega_1 b_- \\ \omega_1 b_+ & -(\omega_0 - \omega) b_- \end{pmatrix}$$

2.4

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\Delta\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \Delta\omega \end{pmatrix} |\tilde{\psi}\rangle$$

avec $\Delta\omega = \omega - \omega_0$

2.5 $R(t)$ place le problème dans le référentiel tournant autour de Oz à la pulsation ω.
Dans ce référentiel, les éqs. diffs. obéies par (b_+, b_-) sont à coefficients cts.

3.1 $\Omega = \pm\sqrt{(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2}$

3.2 $\tilde{H} = \frac{\hbar}{2}(-\Delta\omega)\begin{pmatrix} 1 & tg\theta \\ tg\theta & -1 \end{pmatrix}$ $\quad tg\theta = -\frac{\omega_1}{\Delta\omega}$

$(1-x)(-1-x) - tg^2\theta = 0 = x^2 - 1 - tg^2\theta$

$x^2 = 1 + tg^2\theta = \frac{1}{\cos^2\theta}$ $\quad x = \pm\frac{1}{\cos\theta}$

Les valeurs propres sont $\quad E_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}(-\Delta\omega)\frac{1}{\cos\theta}$

3.3 Vecteurs propres $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ $\quad a + tg\theta \cdot b = \frac{1}{\cos\theta} \cdot a$

$a\left(1 - \frac{1}{\cos\theta}\right) + \frac{\sin\theta}{\cos\theta} b = 0$

$a(\cos\theta - 1) + \sin\theta\, b = 0$

$a \cdot (-2\sin^2\theta/2) + 2\sin\theta/2 \cos\theta/2 \cdot b = 0$

$-\sin\theta/2 \cdot a + \cos\theta/2\, b = 0$

$\Rightarrow \quad b = \sin\theta/2 \quad a = \cos\theta/2$

ainsi que le vecteur $\perp$.

D'où $|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle$

$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|-\rangle$

3.~~4~~

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = c_+ e^{-i\Omega \frac{t}{2}} |\psi_+\rangle + c_- e^{i\Omega \frac{t}{2}} |\psi_-\rangle$$

avec c_+ et c_- deux constantes.

$$|\tilde{\psi}(0)\rangle = |+\rangle = c_+ |\psi_+\rangle + c_- |\psi_-\rangle$$

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

$$\Rightarrow \quad c_+ = \cos\theta/2 \qquad c_- = \sin\theta/2$$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \cos\theta/2 \, e^{-i\Omega \frac{t}{2}} |\psi_+\rangle + \sin\theta/2 \, e^{i\Omega \frac{t}{2}} |\psi_-\rangle$$

$$b_-(t) = \langle - | \tilde{\psi}\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2} \sin\tfrac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2} - \sin\theta/2 \cos\theta/2 \, e^{i\Omega t/2}$$

$$= \frac{1}{2}\sin\theta \cdot (-2i) \sin(\Omega t/2) = -i \sin\theta \sin\left(\Omega t/2\right)$$

3.~~5~~

$$P_{+-}(t) = |\langle \psi(t) | - \rangle|^2 = |a_-(t)|^2$$

$$= |b_-(t)|^2 = \left| \cos\theta/2 \sin\theta/2 \, e^{-i\Omega t/2} - \sin\theta/2 \cos\theta/2 \, e^{i\Omega \frac{t}{2}} \right|^2$$

$$= \left(\cos\theta/2 \sin\theta/2\right)^2 4 \cdot \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

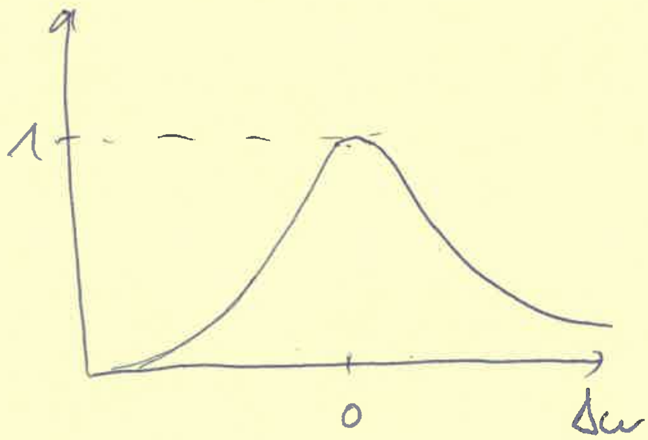
$$= \sin^2\theta \cdot \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

$$\sin^2\theta = \cos^2\theta \cdot tg^2\theta$$

$$= \frac{\cancel{(\Delta\omega)^2}}{(\Delta\omega)^2+(\omega_1)^2} \cdot \frac{(\omega_1)^2}{\cancel{(\Delta\omega)^2}}$$

$$P_{+-}(t) = \frac{\omega_1^2}{(\Delta\omega)^2+\omega_1^2} \cdot \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

3.6 Prefacteur $\frac{\omega_1^2}{(\Delta\omega)^2+\omega_1^2}$



Pour $\Delta\omega = 3\omega_1$

$$\frac{\omega_1^2}{9\Delta\omega_1^2+\omega_1^2} = \frac{1}{10}$$

Il faut ajuster $\omega \simeq \omega_0$ pour pouvoir agir efficacement sur l'état du spin par résonance magnétique.

8

4.1 On a

$$\frac{d}{dt}\langle M\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [M, H(t)]\rangle$$ Théorème de Heisenberg.

4.2

$$[\vec{M}, \vec{M}\cdot\vec{B}] = [\gamma\vec{S}, -\gamma(S_xB_x + S_yB_y + S_zB_z)]$$

$$[S_x, \cancel{\alpha\gamma} S_xB_x + S_yB_y + S_zB_z]$$

$$= B_y[S_x, S_y] + B_z[S_x, S_z]$$

$$= i\hbar(B_yS_z - B_zS_y)$$

$$[M_x, \vec{M}\cdot\vec{B}] = -\gamma^2 i\hbar(B_yS_z - B_zS_y)$$

et

$$[M_y, \vec{M}\cdot\vec{B}] = -\gamma^2 i\hbar(B_zS_x - B_xS_z)$$

$$[M_z, \vec{M}\cdot\vec{B}] = -\gamma^2 i\hbar(B_xS_y - B_yS_x)$$

$\hookrightarrow$ $$[\vec{M}, \vec{M}\cdot\vec{B}] = -\gamma^2 i\hbar\,\vec{B}\times\vec{S} = \gamma^2 i\hbar\,\vec{S}\times\vec{B}$$

$$\frac{d}{dt}\langle M\rangle(t) = \gamma\langle\vec{M}\times\vec{B}\rangle = \gamma\langle\vec{M}\rangle\times\vec{B}$$

Précession de <u>Larmor</u>