Système à deux spins

Nous nous intéressons maintenant à la construction de la base des états pour un système à deux spins 1/2. Chacun des deux spins pouvant être dans un état $|\alpha>$ ou $|\beta>$ il est clair que nous pourrons trouver 4 situations différentes, donc 4 états possibles pour ces deux spins :

Noyaux 1	Noyaux 2
$\lvert\alpha>$	$\lvert\alpha>$
$\lvert\alpha>$	$\lvert\beta>$
$\lvert\beta>$	$\lvert\alpha>$
$\lvert\beta>$	$\lvert\beta>$

On peut créer une base de vecteur orthonormés en effectuant le produit direct entre les vecteurs de la base propre de chacun des deux spins :

$\lvert\alpha>\otimes\lvert\alpha>$	noté pour simplifier	$\lvert\alpha\alpha>$
$\lvert\alpha>\otimes\lvert\beta>$		$\lvert\alpha\beta>$
$\lvert\beta>\otimes\lvert\alpha>$		$\lvert\beta\alpha>$
$\lvert\beta>\otimes\lvert\beta>$		$\lvert\beta\beta>$

Dans cette notation on doit bien garder en mémoire que le premier symbole représente le spin du noyau 1 et le deuxième le spin du noyau 2. Ces quatre vecteurs définissent une base de l'espace des états du système à deux spins, l'espace des états est donc maintenant de dimension 4.

Que deviennent les opérateurs de spin dans cette nouvelle base ? Si nous écrivons :

$$\mathbf{I}_{z1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{I}_{z2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

il est clair que ces expressions ne sont valables que dans leur propre base individuelle $|\alpha>$, $|\beta>$, mais dans notre nouvelle base à 2 spins ils doivent être représentés par des matrices 4x4. Ils doivent être aussi des objets différenciés pour les distinguer.

Pour transformer ces opérateurs dans la nouvelle base, on utilise la même opération que pour les vecteurs, le produit direct. Nous allons multiplier ainsi l'opérateur $\mathbf{I}_{z1}$ exprimé dans sa base à deux dimensions par l'opérateur unité qui représentera la dimension de l'espace associer au second spin :

$$\mathbf{I}_{z1} = \mathbf{I}_z \otimes \mathbf{1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Dans cette expression **1** en caractère gras est la matrice unité. La multiplication s'effectue de la manière suivante, on prend le premier terme de la première matrice, on le multiplie par la seconde matrice, et la matrice ainsi obtenue est placée dans le résultat à la place du terme dont il est issu, c'est à dire en position 11. Ensuite on prend le terme 12 et on recommence, et ainsi de suite. Remarquer que cette opération fait bien passer l'opérateur de la dimension 1 à la dimension 4. Noter aussi que l'opérateur obtenu est parfaitement compatible avec la base $|\alpha\alpha>$, $|\alpha\beta>$, $|\beta\alpha>$, $|\beta\beta>$, vecteurs pour lesquelles $\mathbf{I}_{z1}$ a pour valeurs propres +1/2, +1/2, -1/2 et –1/2 respectivement.

Pour ne pas alourdir la notation on élimine les parenthèses intérieures :

$$\mathbf{I}_{z1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On obtient de même $\mathbf{I}_{z2}$ mais en inversant l'ordre des facteurs, la matrice unité d'abord, représentant l'espace du spin un, et $\mathbf{I}_z$ ensuite, représentant l'opérateur du spin 2 dans son espace propre :

$$\mathbf{I}_{z2} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On procède de même pour obtenir tous les opérateurs utiles :

$$\mathbf{I}_{x1} = \mathbf{I}_x \otimes \mathbf{1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{x2} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{y1} = \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{1} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{y2} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

L'ensemble de ces opérateurs va nous permettre de calculer les opérateurs nécessaires pour exprimer l'énergie associée à un système de deux spins couplés placés dans un champ magnétique. Nous aurons besoin pour cela de la somme ($\mathbf{I}_{x1}\mathbf{I}_{x2}+\mathbf{I}_{y1}\mathbf{I}_{y2}+\mathbf{I}_{z1}\mathbf{I}_{z2}$).

$$\mathbf{I}_{z1}\mathbf{I}_{z2} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{x1}\mathbf{I}_{x2} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{y1}\mathbf{I}_{y2} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Remarquons ici que $\mathbf{I}_{z1}\mathbf{I}_{z2}$ est diagonal dans la base utilisée, mais que $\mathbf{I}_{x1}\mathbf{I}_{x2}+\mathbf{I}_{y1}\mathbf{I}_{y2}$ ne l'est pas :

$$\mathbf{I}_{x1}\mathbf{I}_{x2} + \mathbf{I}_{y1}\mathbf{I}_{y2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nous verrons que ce fait est à l'origine de la notion de spectres du premier ou du second ordre.
Finalement, la somme dont nous aurons besoin est :

$$\mathbf{I}_{z1}\mathbf{I}_{z2} + \mathbf{I}_{x1}\mathbf{I}_{x2} + \mathbf{I}_{y1}\mathbf{I}_{y2} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$