



HAL
open science

Probabilités de transition dans un champ haute fréquence d'amplitude variable

Jean-Pierre Barrat, J.M. Winter

► **To cite this version:**

Jean-Pierre Barrat, J.M. Winter. Probabilités de transition dans un champ haute fréquence d'amplitude variable. *Journal de Physique et le Radium*, 1956, 17 (10), pp.833-841. 10.1051/jphys-rad:019560017010083300 . jpa-00235565

HAL Id: jpa-00235565

<https://hal.science/jpa-00235565>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LE JOURNAL DE PHYSIQUE

ET

LE RADIUM

PROBABILITÉS DE TRANSITION DANS UN CHAMP HAUTE FRÉQUENCE D'AMPLITUDE VARIABLE

Par J. P. BARRAT et J. M. WINTER,

Laboratoire de Physique de l'E. N. S.

Sommaire. — La répartition dans l'espace du champ haute fréquence appliqué aux atomes d'un jet explique les anomalies observées par Kusch dans la variation de la largeur des raies de résonance magnétique en fonction de la grandeur de ce champ. L'intégration exacte des équations d'évolution est effectuée dans des cas particuliers. Des méthodes d'approximation au voisinage du centre ou sur les ailes de la raie de résonance permettent de généraliser les résultats et de les interpréter physiquement.

I. Introduction. — Pour induire les transitions hyperfines des atomes d'un jet atomique [1] [2], le jet passe dans une région où règne à la fois un champ magnétique statique H_0 et un champ haute fréquence tournant H_1 . L'amplitude H_1 que voit l'atome est variable. Pour calculer les probabilités de transition on suppose généralement [3], [4] que H_1 est d'amplitude constante pendant un temps T_1 (pulse rectangulaire).

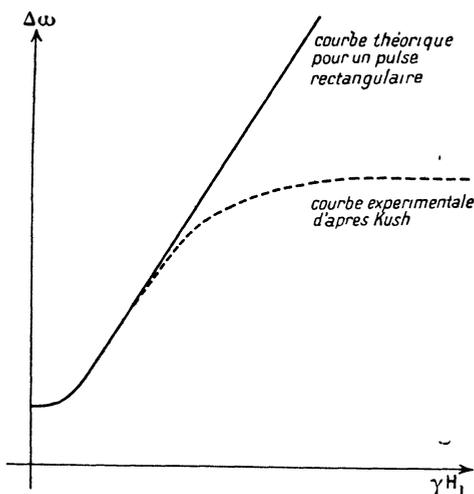


Fig. 1.

Des expériences récentes [5] ont montré qu'il existe un désaccord complet entre les résultats de ces calculs et l'expérience quand on utilise de fortes valeurs du champ de radio-fréquence. Ce désaccord porte entre autres sur la largeur de raie. La théorie prévoit (pour un pulse rectangulaire)

une largeur $\Delta\omega$ variant proportionnellement à l'amplitude γH_1 du champ haute fréquence (γ rapport gyromagnétique), sauf pour les faibles valeurs de ce champ (fig. 1). Le détail de cette variation dépend beaucoup de la répartition spatiale du champ haute fréquence.

Nous allons montrer qu'une répartition qui diffère d'un pulse rectangulaire conduit à des formes de raies qui ont une largeur plus faible que γH_1 . Nous aborderons le problème de trois façons. 1) Par intégration directe des équations d'évolution dans des cas particuliers. 2) En développant la solution en série, soit au centre, soit sur les ailes. 3) En utilisant le modèle du référentiel tournant [6] et en considérant le cas où la variation de $\gamma H_1(t)$ est lente (approximation adiabatique).

II. Équation d'évolution. — Nous étudierons le cas d'une transition dipolaire magnétique entre deux niveaux a et b. (La transition obéissant à la règle de sélection $\Delta m = \pm 1$ pour le nombre quantique magnétique m). L'atome est soumis à un champ tournant H_1 perpendiculaire à H_0 d'amplitude $H_1(x)$ variable d'un point à l'autre du jet, un atome de vitesse v étant soumis à un champ d'amplitude variable $H_1(vt)$. L'Hamiltonien de perturbation s'écrit :

$$\mathcal{H}_p = \hbar \left[\sum_j \gamma_j (J_{jx} + iJ_{jy}) H_1(t) e^{-i\omega t} + \sum_j \gamma_j (J_{jx} - iJ_{jy}) H_1^*(t) e^{i\omega t} \right]$$

ω fréquence du champ tournant.

Posons

$$\langle a | \mathcal{H}_p | b \rangle = \hbar \gamma H_1(t) e^{-i\omega t}.$$

Les équations d'évolution de la fonction d'onde Ψ

$$\Psi = C_a(t) \psi_a + C_b(t) \psi_b$$

sont

$$\begin{cases} iC'_a = \frac{\omega_0}{2} C_a + \gamma H_1(t) e^{-i\omega t} C_b \\ iC'_b = -\frac{\omega_0}{2} C_b + \gamma H_1^*(t) e^{i\omega t} C_a \\ \hbar\omega_0 = E_a - E_b. \end{cases}$$

Posons

$$K_a = C_a e^{\frac{i\omega t}{2}} \quad K_b = C_b e^{-\frac{i\omega t}{2}} \quad \alpha = \frac{1}{2}(\omega_0 - \omega).$$

Le système devient

$$\begin{cases} iK'_a = \alpha K_a + \gamma H_1(t) K_b \\ iK'_b = -\alpha K_b + \gamma H_1^*(t) K_a. \end{cases} \quad (1)$$

Supposons γH_1 réel (Ceci revient à dire que H_1 vibre en phase dans toute la région de haute fréquence). Le système (1) se résout exactement quand γH_1 est constant. Ceci donne la solution dans le cas d'un pulse rectangulaire de durée T_1 .

On trouve

$$P = \frac{\gamma^2 H_1^2}{\gamma^2 H_1^2 + \alpha^2} \sin^2 T_1 \sqrt{\alpha^2 + \gamma^2 H_1^2}.$$

P étant la probabilité de transition entre a et b .

Si l'on effectue une moyenne sur les vitesses (T_1 dépendant de la vitesse de l'atome) des atomes du jet et si

$$\gamma H_1 \Delta T_1 \gg 1$$

(ΔT_1 étant l'écart quadratique de la répartition des temps de passage par rapport au temps moyen de passage)

On obtient

$$\langle P \rangle = \frac{1}{2} \frac{(\gamma H_1)^2}{\alpha^2 + (\gamma H_1)^2}.$$

La raie a une forme de Lorentz. La largeur $\Delta\omega$ varie proportionnellement à γH_1 . Ceci est en contradiction avec l'expérience (5) lorsque γH_1 est très grand.

III. Solutions dans des cas particuliers. —

1) RÉPARTITION EN ÉCHELONS : La répartition réelle de $\gamma H_1(t)$ étant une courbe continue, on peut penser se rapprocher de la réalité en utilisant une répartition $\gamma H_1(t)$ en échelons (fig. 2).

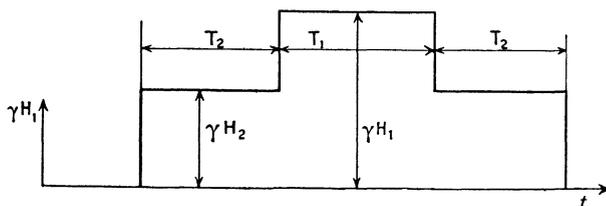


FIG. 2.

Les résultats du calcul sont les suivants :

si

$$\begin{aligned} \gamma H_1 \Delta T_1 &\gg 1 \\ \gamma H_2 \Delta T_2 &\gg 1 \\ \gamma H_2 &< \gamma H_1 \end{aligned}$$

on obtient une forme de raie au voisinage immédiat de la résonance (α petit) ne dépendant que de γH_2 .

Ce sont les régions de faible intensité de radiofréquence (aile de la répartition) qui déterminent la forme de la raie au voisinage du centre. Nous verrons d'autres exemples analogues d'affinement.

2) RÉPARTITIONS EXPONENTIELLES : Nous ferons le calcul dans le cas de la répartition suivante :

$$\left. \begin{aligned} \text{pour } t < 0 \quad \gamma H_1(t) &= \gamma H_1 e^{\Gamma t} \\ t > 0 \quad \gamma H_1(t) &= \gamma H_1 e^{-\Gamma t} \end{aligned} \right\} \text{ (fig. 3).}$$

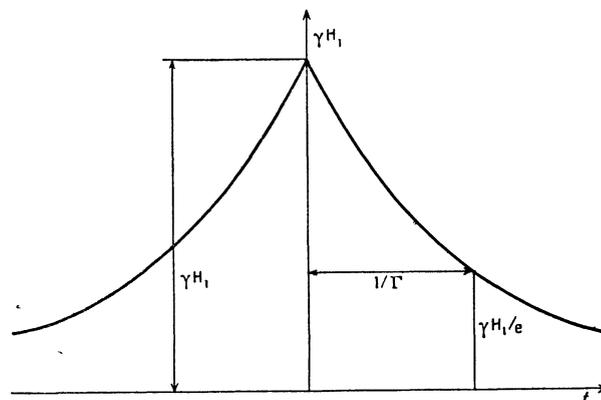


FIG. 3.

Le système (1) se ramène à

$$K'_b - \frac{\gamma H_1'(t)}{\gamma H_1(t)} K'_b + K_b [\alpha^2 + (\gamma H_1(t))^2 + i\alpha \frac{\gamma H_1'(t)}{\gamma H_1(t)}] = 0. \quad (2)$$

Si

$$\gamma H_1(t) = \gamma H_1 e^{\Gamma t} \quad t < 0$$

$$K'_b - \Gamma K'_b + K_b (\alpha^2 + \gamma^2 H_1^2 e^{2\Gamma t} + i\alpha \Gamma) = 0.$$

Cette équation a pour solution

$$K_b = e^{\frac{\Gamma t}{2}} \left[(A_-) J_{\frac{1}{2} - i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma} e^{\Gamma t} \right) + (B_-) J_{-\frac{1}{2} + i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma} e^{\Gamma t} \right) \right].$$

De même pour

$$t > 0 \quad \gamma H_1 = \gamma H_1 e^{-\Gamma t}$$

on a la solution

$$K_b = e^{-\frac{\Gamma t}{2}} \left[(A_+) J_{\frac{1}{2} + i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma} e^{-\Gamma t} \right) + (B_+) J_{-\frac{1}{2} - i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma} e^{-\Gamma t} \right) \right]$$

A_-, B_-, A_+, B_+ étant des constantes.
 J_ν étant la fonction de Bessel d'ordre ν .
 Prenons comme conditions initiales :
 pour

$$t = -\infty \quad K_b = 0 \quad |K_a| = 1.$$

Ceci détermine A_- et B_-

$$B_- = 0 \quad A_- = \sqrt{\frac{\gamma H_1}{2\Gamma}} \left(-\frac{i\alpha}{\Gamma} - \frac{1}{2}\right)!$$

Nous allons calculer

$$P(t = +\infty) = |K_b(t = +\infty)|^2.$$

Quand t tend vers l'infini

$$K_b \rightarrow (B_+) \left(\frac{\gamma H_1}{2\Gamma}\right)^{-\frac{1}{2}-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \frac{e^{i\alpha t}}{\left(-\frac{i\alpha}{\Gamma} - \frac{1}{2}\right)!} + (A_+) \left(\frac{\gamma H_1 e^{-\Gamma t}}{2\Gamma}\right)^{\frac{1}{2}+i\frac{\alpha}{\Gamma}} \frac{e^{-\frac{\Gamma t}{2}}}{\left(\frac{1}{2} + i\frac{\alpha}{\Gamma}\right)!}$$

Le deuxième terme tend vers zéro, donc

$$K_b(t \rightarrow +\infty) \rightarrow (B_+) \left(\frac{\gamma H_1}{2\Gamma}\right)^{-\frac{1}{2}-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \frac{e^{i\alpha t}}{\left(-\frac{i\alpha}{\Gamma} - \frac{1}{2}\right)!}$$

Il ne nous sera donc nécessaire que de connaître la valeur de B_+ . B_+ se calcule en ajustant les K_b et K'_b pour $t = 0$. On trouve.

$$K_b = \frac{\pi}{2} \frac{\gamma H_1}{\Gamma} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right)^{-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \frac{e^{i\alpha t}}{\operatorname{ch} \frac{\alpha \pi}{\Gamma}} \left[J_{\frac{1}{2}-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) J'_{\frac{1}{2}+i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) + J_{\frac{1}{2}+i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) J'_{\frac{1}{2}-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) + \frac{\Gamma}{\gamma H_1} J_{\frac{1}{2}-i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) J_{\frac{1}{2}+i\frac{\alpha}{\Gamma}} \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) \right].$$

La valeur de K_b ainsi obtenue l'a été sans aucune approximation.

Si nous supposons

$$\frac{\gamma H_1}{\Gamma} \gg 1$$

ce qui revient à dire que la valeur maximum de $\gamma H_1(t)$ est grande devant l'inverse de la largeur de la répartition

et

$$\alpha \ll \gamma H_1$$

(on ne s'intéresse qu'à la zone centrale de la raie), on peut remplacer les fonctions de Bessel par leurs développements asymptotiques pour $\frac{\gamma H_1}{\Gamma}$ grand.

On trouve alors

$$P = \frac{\sin^2 \left(2 \frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\pi \alpha}{\Gamma}\right)}$$

Γ dépend de la vitesse des atomes et si l'on fait une moyenne sur les vitesses

$$\Delta \left(\frac{\gamma H_1}{\Gamma}\right) \gg 1$$

donc

$$\langle P \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\pi \alpha}{\bar{\Gamma}}} \quad (\bar{\Gamma} \text{ étant la valeur moyenne de } \Gamma).$$

Nous constatons que $\langle P \rangle$ est complètement indépendant de γH_1 et que la largeur de raie $\Delta \omega$ est de l'ordre de Γ . La largeur de raie pour γH_1 grand demeure constante.

Comme $\frac{\gamma H_1}{\Gamma}$ est grand devant 1, le calcul précédent demeure valable pour α de l'ordre de Γ , car si $\alpha \sim \Gamma$ on a $\alpha \ll \gamma H_1$. La formule précédente

donne la forme de raie pour des α qui s'étendent au delà de la demi-largeur. Ceci est en accord avec les résultats de Kusch [5].

Le calcul peut s'étendre au cas d'une distribution comprenant un palier de durée T_1 entre les deux exponentielles. On trouve alors :

$$|K_b| = \frac{\sin \left(\frac{2\gamma H_1}{\Gamma} + \gamma H_1 T_1\right)}{\operatorname{ch} \frac{\pi \alpha}{\Gamma}}$$

ce qui conduit à la même valeur de $\langle P \rangle$.

Ici encore la forme de raie ne dépend que de Γ , c'est-à-dire de la manière dont γH_1 varie au cours du temps.

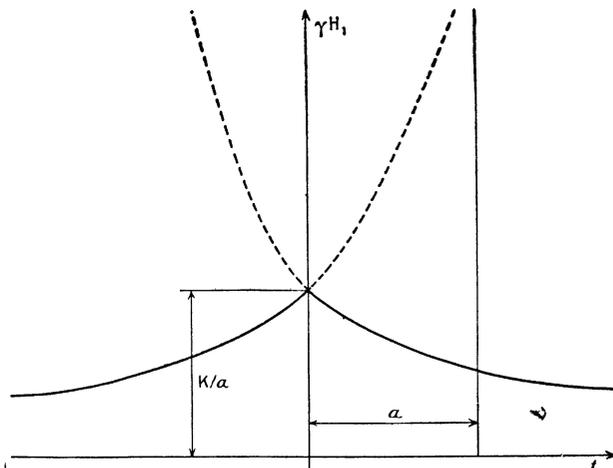


FIG. 4.

3) DISTRIBUTION EN $\frac{1}{t}$. — Nous prenons ici la répartition suivante

$$\begin{cases} t > 0 & \gamma H_1 = \frac{k}{t+a} \\ t < 0 & \gamma H_1 = \frac{k}{a-t} \end{cases}$$

a donne une idée de la largeur de la répartition, k de son amplitude (fig. 4).

Pour résoudre le système (1) posons

$$\begin{aligned} u &= K_a + K_b \\ v &= K_a - K_b \end{aligned}$$

On vérifie que u et v satisfont aux équations

$$\begin{cases} v'' + v(\alpha^2 + \gamma^2 H_1^2(t) - i\gamma H_1'(t)) = 0 \\ u'' + u(\alpha^2 + \gamma^2 H_1^2(t) + i\gamma H_1'(t)) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Dans le cas de la répartition actuelle et pour $t < 0$ l'équation (3) s'écrit

$$v'' + v\left(\alpha^2 + \frac{k^2}{(a-t)^2} + \frac{ik}{(a-t)^2}\right) = 0$$

Elle a pour solution

$$\begin{aligned} v(t < 0) &= \sqrt{\alpha(a-t)} \\ &\left\{ A_-^{(1)} H_{\frac{1}{2}+ik}^{(1)}(\alpha(a-t)) + A_-^{(2)} H_{\frac{1}{2}+ik}^{(2)}(\alpha(a-t)) \right\} \end{aligned}$$

$H_\nu^{(1)}$ et $H_\nu^{(2)}$ fonctions de Hankel d'ordre ν .
Ce n'est pas valable si $\alpha = 0$.

Si l'on prend comme conditions pour $t = -\infty$

$$v - u = 0 \quad |v + u| = 2$$

l'on obtient

$$A_-^{(2)} = 0 \quad A_-^{(1)} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{k\pi}{2}}$$

Pour $t > 0$:

$$\begin{aligned} v(t > 0) &= \sqrt{\alpha(a+t)} \\ &\left\{ A_+^{(1)} H_{\frac{1}{2}-ik}^{(1)}(\alpha(a+t)) + A_+^{(2)} H_{\frac{1}{2}-ik}^{(2)}(\alpha(a+t)) \right\} \end{aligned}$$

Le raccord des solutions pour $t = 0$ détermine $A_+^{(1)}$ et $A_+^{(2)}$

$$A_+^{(1)} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\pi\alpha a}{4} e^{\frac{k\pi}{2}} \left\{ H_{\frac{1}{2}-ik}^{(1)}(\alpha a) H_{\frac{1}{2}-ik}^{(2)}(\alpha a) - H_{\frac{1}{2}+ik}^{(1)}(\alpha a) H_{\frac{1}{2}+ik}^{(2)}(\alpha a) \right\}$$

$$A_+^{(2)} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\pi\alpha a}{4} e^{-\frac{k\pi}{2}} \left\{ e^{k\pi} \left[H_{\frac{1}{2}-ik}^{(1)}(\alpha a) \right]^2 + e^{-k\pi} \left[H_{\frac{1}{2}+ik}^{(1)}(\alpha a) \right]^2 \right\}$$

Pour calculer $u(t > 0)$ il suffit de changer k en $-k$. Nous nous intéressons à la valeur de P pour $t \rightarrow +\infty$. On trouve en remplaçant les fonctions de Hankel par leur développement asymptotique pour

$$\alpha(a+t) \gg k \quad (4)$$

$$K_b = \frac{(u-v)}{2} = \frac{\pi\alpha a}{4} e^{i\alpha(a+t)} \left\{ H_{\frac{1}{2}-ik}^{(1)}(\alpha a) H_{\frac{1}{2}-ik}^{(2)}(\alpha a) - H_{\frac{1}{2}+ik}^{(1)}(\alpha a) H_{\frac{1}{2}+ik}^{(2)}(\alpha a) \right\} \quad (5)$$

Supposons $k \gg 1$, $\frac{k}{a} \gg \frac{1}{a}$, ceci revient à dire que la valeur maximum de γH_1 est plus grande que l'inverse de la largeur de la répartition. Supposons aussi $\alpha a \ll k$, c'est-à-dire α inférieur à la valeur maximum de γH_1 . On peut alors utiliser pour le calcul de K_b les développements des fonctions de Hankel pour $\alpha a \ll k$.

On trouve alors

$$\begin{aligned} K_b &= \frac{\alpha a}{2k^2} \\ \langle P \rangle &= \left(\frac{\alpha a}{2k^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (6)$$

Nous voyons que $\langle P \rangle$ croît avec α mais dans la zone où $\alpha a \ll k$, $\langle P \rangle$ demeure très faible (fig. 5, zone II).

Il faut étudier à part le cas $\alpha = 0$. De façon très générale les équations s'intègrent alors exacte-

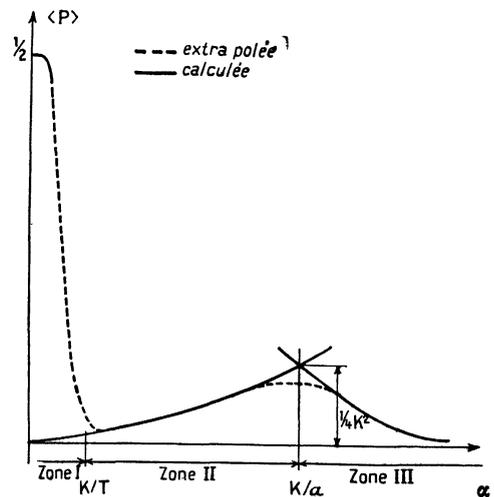


FIG. 5.

ment. On trouve

$$K_b(t) = i \sin \left\{ \int_{-\infty}^t \gamma H_1(t) dt \right\}.$$

Dans le cas présent (répartition en $\frac{1}{t}$) nous ne pouvons supposer que la perturbation commence à $-\infty$ car l'intégrale divergerait. Nous supposons que l'intégrale s'étend de $-T$ à $+T$ et que $T \gg a$, ceci signifie que nous coupons la répartition à une distance très grande devant sa largeur. On trouve

$$|K_b(T)| = \sin \left\{ 2k \text{Log} \frac{(a+T)}{a} \right\}.$$

Si l'on moyenne sur les vitesses les écarts de $kL \frac{(a+T)}{a}$ par rapport à sa valeur moyenne seront grands devant 1, car $k \gg 1$ et $L \frac{(a+T)}{a}$ est aussi très grand devant 1. On trouve alors

$$\langle P(\alpha = 0) \rangle = \frac{1}{2}.$$

Pour α très petit d'après (6) $\langle P \rangle$ est très petit (T étant supposé infini); pour $\alpha = 0$ $\langle P \rangle = \frac{1}{2}$ (ceci est aussi valable pour T infini). Dans ce cas la raie comporte une pointe infiniment fine pour $\alpha = 0$.

Si T est fini la formule (6) n'est valable que si $\alpha T \gg k$ compte tenu de la condition (4). Sinon nous ne pourrions pour $t = -T$ et $t = T$ remplacer les fonctions de Hankel par leur développement asymptotique.

En résumé la formule (6) n'est valable qu'entre les limites suivantes

$$\alpha T \gg k \gg \alpha a \text{ ou } \frac{k}{T} \ll \alpha \ll \frac{k}{a}.$$

(Ceci limite la zone II de la validité de la formule (6)).

Nous donnerons dans le paragraphe IV une méthode qui permettra de calculer $\langle P \rangle$ au voisinage du centre.

Nous pouvons également calculer la probabilité de transition dans la région III pour $\alpha a \gg k \gg 1$.

Dans ce cas nous remplacerons dans (5) les fonctions de Hankel par les développements asymptotiques (αa grand devant l'indice). Il est nécessaire de pousser le développement jusqu'au terme en $\frac{1}{(\alpha a)^2}$, tous les termes inférieurs étant nuls. On trouve

$$u(t) = e^{-iS} \left[1 + (-i\alpha) \int_{-T}^t e^{2iS(t')} dt' + (-i\alpha)^2 \int_{-T}^t e^{2iS(t')} dt' \int_{-T}^{t'} e^{-2iS(t'')} dt'' + \dots + (-i\alpha)^{2n} \int_{-T}^t e^{2iS(t')} dt' \int_{-T}^{t'} e^{-2iS(t'')} dt'' \dots \int_{-T}^{t'^{n-1}} e^{-2iS(t^{2n})} dt^{2n} + \dots \right]$$

$$K_b = \frac{1}{2} \frac{k}{(\alpha a)^2}$$

d'où

$$P = \frac{1}{4} \left[\frac{k}{(\alpha a)^2} \right]^2.$$

Notons que si dans les formules (7) et (6) nous faisons $k = \alpha a$, nous trouvons dans les deux cas $P = \frac{1}{4k^2}$. Ceci donne une valeur maximum que P ne dépasse probablement pas. Comme $k \gg 1$ cette valeur est très faible.

L'intégration de cas conduit donc à une raie très fine. Les ailes présentent une remontée mais demeurent très faibles.

IV. — Solution générale près du centre. — En posant

$$\begin{aligned} u &= K_a + K_b \\ v &= K_a - K_b \end{aligned}$$

le système (1) devient :

$$\begin{cases} iu' = \gamma H_1 u + \alpha v \\ iv' = -\gamma H_1 v + \alpha u. \end{cases} \quad (8)$$

Sous cette forme il est clair que les équations s'intègrent quand $\alpha = 0$.

$$u = e^{-iS}$$

$$v = e^{+iS} \quad S = \int_{-T}^t \gamma H_1(t) dt.$$

En adoptant comme conditions initiales

$$\begin{cases} K_a = 1 \\ K_b = 0 \quad t = -T. \end{cases}$$

On en déduit

$$P = |K_b|^2 = \sin^2 S$$

et si $\Delta S \gg 1$ la moyenne sur les vitesses conduit à la probabilité moyenne

$$\langle P(\alpha = 0) \rangle = \frac{1}{2}.$$

L'intensité au centre ne dépend donc pas de la répartition du champ haute fréquence. (Ceci est en accord avec les résultats de Kusch.)

Dans le cas général on peut trouver une solution sous la forme d'une série entière en α . Posons

$$\begin{cases} u = \sum_{n=0}^{\infty} u_n & u_n = \alpha^n U_n \\ v = \sum_{n=0}^{\infty} v_n & v_n = \alpha^n V_n. \end{cases}$$

En résolvant le système (8) par approximations successives on trouve

$v(t)$ s'obtient en changeant S en $-S$.

Cette série est toujours convergente car

$$|u_n| < \alpha^n \int_{-T}^t dt' \int_{-T}^{t'} dt'' \dots \int_{-T}^{t^{n-1}} dt^n = \alpha^n \left(\frac{t+T}{n!} \right)^n$$

terme général d'une série convergeant quel que soit α .

Choisissons l'origine des temps de telle façon que si T' est le temps où cesse la perturbation :

$$S(0) = \frac{S(T')}{2} = \bar{S}.$$

Nous calculerons u , v , K_b et P jusqu'au deuxième ordre en α et pour $t = T'$

$$u_1 = (-i\alpha) e^{-2i\bar{S}} \int_{-T}^{+T'} e^{2iS} dt.$$

Posons

$$S' = 2\bar{S} - S = \int_t^{T'} \gamma H_1(t) dt$$

$$u_1 = (-i\alpha) e^{-2i\bar{S}} \int_{-T}^0 e^{2iS} dt + (-i\alpha) e^{2i\bar{S}} \int_0^{T'} e^{-2iS'} dt.$$

Posons

$$S_1 = \int_{-T}^0 \sin 2S dt \quad S'_1 = \int_0^{T'} \sin 2S' dt$$

$$C_1 = \int_{-T}^0 \cos 2S dt \quad C'_1 = \int_0^{T'} \cos 2S' dt$$

$$u_1 = (-i\alpha) e^{-2i\bar{S}} (C_1 + iS_1) + (-i\alpha) e^{2i\bar{S}} (C'_1 - iS'_1).$$

On en déduit

$$K_{b,1} = \alpha \sin 2\bar{S} (C_1 - C'_1) + \alpha \cos 2\bar{S} (S'_1 - S_1).$$

On calcule de même le terme du second ordre en séparant les intégrales en intégrales pour t positif et pour t négatif.

$$K_{b,2} = -i\alpha^2 \left[\sin 2\bar{S} \left\{ \frac{1}{2} (C_1 - C'_1)^2 + \frac{1}{2} (S_1 + S'_1)^2 \right\} - (R + R' + S_1 C'_1 + C_1 S'_1) \cos 2\bar{S} \right]$$

avec

$$R = \int_{-T}^0 \sin 2S(t) dt' \int_{t'}^0 \cos 2S(t'') dt'' - \int_{-T}^0 \cos 2S(t) dt' \int_{t'}^0 \sin 2S(t'') dt''$$

$$R' = \int_0^{T'} \sin 2S(t) dt' \int_0^{t'} \cos 2S(t'') dt'' - \int_0^{T'} \cos 2S(t) dt' \int_0^{t'} \sin 2S(t'') dt''$$

d'où

$$P_2(T') = \sin^2 2\bar{S} (1 - \alpha^2 (S_1 + S'_1)^2) - 2\alpha^2 \cos 2\bar{S} \sin 2\bar{S} (R + R' + S'_1 C'_1 + S_1 C_1) + \alpha^2 \cos^2 2\bar{S} (S_1 - S'_1)^2.$$

Dans le cas important des distributions symétriques.

$$S_1 = S'_1 \quad C_1 = C'_1 \quad R = R'$$

$$P_2(T')_{\text{sym}} = \sin^2 2\bar{S} (1 - 4\alpha^2 S_1^2) - 4\alpha^2 \cos 2\bar{S} \sin 2\bar{S} (R + C_1 S_1).$$

Appliquons cette formule à la répartition (déjà étudiée) formée d'un palier entre deux exponentielles. Avec les notations déjà utilisées :

Si

$$\frac{\gamma H_1}{\Gamma} \gg 1$$

on trouve

$$S_1 = \frac{\pi}{2\Gamma} \quad R + C_1 S_1 = \frac{q}{\Gamma^2}$$

(q constante indépendante de γH_1).

Notons tout de suite que d'après le calcul exact

$$\text{la largeur } \Delta\omega \simeq \frac{1}{S_1}$$

$$\bar{S} = \frac{\gamma H_1}{\Gamma} + \frac{\gamma H_1 T_0}{2}.$$

On trouve

$$P_2 = \sin^2 2\bar{S} \left(1 - \frac{\pi^2 \alpha^2}{\Gamma^2} \right) - 4\alpha^2 \cos 2\bar{S} \sin 2\bar{S} \frac{q}{\Gamma^2}$$

d'où

$$\langle P_2 \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\pi^2 \alpha^2}{\Gamma^2} \right).$$

résultat en accord avec les calculs précédents.

Si

$$\frac{\gamma H_1}{\Gamma} \ll 1 \ll \gamma H_1 T_0,$$

ce qui revient à dire que γH_1 est plus grand que l'inverse de la durée du palier, mais que γH_1 est inférieur à l'inverse de la largeur des exponentielles (en dehors du palier la répartition décroît très vite), on trouve

$$\langle P_2 \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\alpha^2}{\gamma^2 H_1^2} \right) \quad \langle \frac{1}{S_1} \rangle = 2\gamma H_1.$$

C'est le développement de la solution pour un pulse rectangulaire.

Si dans ce cas particulier on porte $\frac{1}{S_1}$ en fonction de γH_1 ses variations présentent les mêmes caractères que celles de la largeur $\Delta\omega$ en fonction

de γH_1 dans les expériences de Kusch. Le calcul peut s'appliquer à d'autres exemples.

a) Un palier complété par deux courbes décroissant en $\frac{1}{t^3}$ (ou plus généralement en $\frac{1}{t^n}$, $n > 3$).

Dans ce cas $\frac{1}{S_1}$ est constant pour γH_1 très grand et $\langle P_2 \rangle$ est indépendant de γH_1 .

b) Appliquons cette méthode aux répartitions en $\frac{1}{t}$ calculées au chapitre précédent. On trouve

$$S_1 = \frac{T}{k}$$

$$\langle P_2 \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - 4 \alpha^2 \frac{\bar{T}^2}{k^2} \right)$$

Le développement poussé au deuxième ordre ne nous permet pas d'avoir la largeur de raie. Dans tous les cas envisagés jusqu'ici $\frac{1}{S_1} \ll \gamma H_1$ moyen.

Il en résulte que la raie décroît plus vite près du centre que dans le cas d'une raie qui aurait pour largeur γH_1 (pulse rectangulaire).

Calculons enfin $\frac{1}{S_1}$ pour des répartitions qui ne s'étendent pas à l'infini.

a) le triangle

$$\begin{cases} \gamma H_1(t) = \frac{\gamma H_1}{T_0} (T_0 - t) & 0 < t < T_0 \\ \gamma H_1(t) = \frac{\gamma H_1}{T_0} (t + T_0) & -T_0 < t < 0 \\ \gamma H_1(t) = 0 & t < -T_0 \text{ ou } t > T_0 \end{cases}$$

b) la répartition.

$$\begin{cases} \gamma H_1(t) = \gamma H_1 \cos \frac{\pi t}{T_0} & -T_0 < t < T_0 \\ \gamma H_1(t) = 0 & t < -T_0 \text{ ou } t > T_0 \end{cases}$$

On trouve dans les deux cas

$$\frac{1}{S_1} = \sqrt{\frac{\gamma H_1}{T_0}}$$

Dans tous les cas examinés, chaque fois que la répartition s'étend jusqu'à l'infini on trouve une largeur très inférieure à γH_1 maximum et qui tend vers une largeur limite (saturation) comme l'a observé Kusch. Le résultat pour un pulse ou pour une répartition ne s'étendant pas à l'infini donne des largeurs de raie qui n'admettent pas de saturation. Elles demeurent plus fines que γH_1 sauf pour le pulse rectangulaire. Il est probable que les résultats expérimentaux de Kusch s'expliquent par les considérations précédentes. Il semble que la quantité $\frac{1}{S_1}$ puisse être interprétée comme une largeur de raie.

V. Solutions générales sur les ailes. — Le système (1) peut aussi se résoudre si $\gamma H_1 = 0$.

$$\begin{cases} K_a = e^{-iat} \\ K_b = 0 \end{cases}$$

et à partir de cette solution on peut résoudre (1) par approximations successives. On trouve :

$$K_b = (-i) e^{iat} \int_{-T}^t \gamma H_1(t') e^{-2iat'} dt' + (-i)^3 e^{iat} \int_{-T}^t \gamma H_1(t') e^{-2iat'} dt' \int_{-T}^{t'} \gamma H_1(t'') e^{2iat''} dt'' \int_{-T}^{t''} \gamma H_1(t''') e^{-2iat'''} dt''' + \dots$$

Cette série converge toujours car

$$|K_{b, 2n+1}| < \frac{1}{(2n+1)!} \left[\int_{-T}^t \gamma H_1(t') dt' \right]^{2n+1}$$

Comme $\int_{-T}^t \gamma H_1(t') e^{-2iat'} dt'$ tend vers zéro quand α tend vers l'infini, plus α est grand, plus la série est rapidement convergente.

Si on calcule K_b en se limitant au premier terme, on trouve dans le cas des exemples déjà traités que la raie décroît plus vite sur les ailes qu'une raie ayant la forme de Lorentz. Par exemple dans le cas de la répartition exponentielle

$$\langle P \rangle \sim \frac{\gamma^2 H_1^2 \bar{T}^2}{\alpha^4} \quad (\text{sur les ailes}).$$

VI. Interprétation physique de l'affinement des raies. — Le système peut être décrit par le modèle classique d'un moment cinétique portant un

moment magnétique \vec{M} soumis aux champs H_0 et $H_1(t)$. Dans un système d'axes R_1 tournant autour de l'axe Oz portant H_0 à la même vitesse angulaire ω que H_1 , le mouvement est le même que si M était soumis à un champ effectif \vec{H}_{eff} , de composantes $H_0 - \frac{\omega}{2\gamma}$ sur Oz et $H_1(t)$ sur un axe Ox perpendiculaire à Oz (6) (avec nos notations, la définition de γ diffère d'un facteur 2 de celle adoptée dans la référence (6)). Si $\beta(t)$ est l'angle de \vec{M} et de Oz, K_a et K_b sont respectivement égaux à $\cos \frac{\beta}{2}$ et $\sin \frac{\beta}{2}$; la condition initiale $K_a = 1$, $K_b = 0$ correspond à $\beta = 0$, et la probabilité de transition de a à b est $\sin^2 \frac{\beta(\infty)}{2}$. \vec{H}_{eff} est porté par Oz hors de la région où agit le champ de radiofréquence H_1 . Dans cette région il tourne dans le

plan xOz . S'il tourne assez lentement, le vecteur \vec{M} , qui lui est parallèle avant la perturbation, lui restera pratiquement parallèle, $\beta(\infty) = 0$ et la probabilité de transition sera pratiquement nulle.

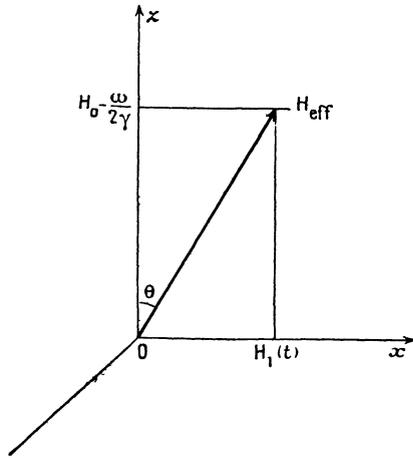


FIG. 6.

Une formulation plus précise de la condition imposée à la variation de $H_1(t)$ s'obtient en considérant un référentiel R_2 , tournant autour de l'axe Oy perpendiculaire au plan xOz en même temps que \vec{H}_{eff} . Soit θ l'angle de \vec{H}_{eff} avec Oz . Le champ effectif auquel est soumis \vec{M} dans R_2 est la résultante de \vec{H}_{eff} et d'une composante de grandeur $\frac{1}{2\gamma} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)$ portée par Oy . Il se réduit à \vec{H}_{eff} et a par suite une direction fixe dans R_2 si $\frac{1}{2|\gamma|} \left| \frac{d\theta}{dt} \right| \ll |\vec{H}_{\text{eff}}|$ (9). Dans ces conditions, \vec{M} , parallèle à \vec{H}_{eff} avant la perturbation, restera fixe par rapport à R_2 et suivra adiabatiquement le mouvement de \vec{H}_{eff} .

L'angle θ est défini par :

$$\theta = \text{Arc tg } \frac{\gamma H_1}{\alpha}.$$

La condition (9) s'écrit alors :

$$|\alpha| \left| \frac{d(\gamma H_1)}{dt} \right| \ll 2(\alpha^2 + (\gamma H_1)^2)^{\frac{1}{2}} \text{ quel que soit } t. \quad (10)$$

Une condition plus restrictive et plus commode sera :

$$\left| \frac{d(\gamma H_1)}{dt} \right| \ll 2(\alpha^2 + (\gamma H_1)^2) \text{ quel que soit } t$$

où $\alpha^2 \gg \left(\frac{1}{2} \frac{d(\gamma H_1)}{dt} \right) - (\gamma H_1)^2_{\text{max}}$. (11)

Dès que α satisfera à cette condition, la probabilité de transition sera très faible. La valeur maximum de $\frac{1}{2} \left| \frac{d(\gamma H_1)}{dt} \right| - (\gamma H_1)^2$ doit donc être de l'ordre du carré de la largeur de la raie. Les largeurs ainsi trouvées sont en accord avec celles que l'on déduit soit des méthodes d'approximation précédentes, soit de l'intégration exacte du système (1). Ainsi pour le cas d'une répartition exponentielle, la condition (11) s'écrit $\alpha \gg \frac{\Gamma}{4}$ pour $\gamma H_1 \geq \frac{\Gamma}{4}$, et $\alpha \gg \sqrt{\left(\frac{\gamma H_1}{2} \Gamma - (\gamma H_1)^2 \right)}$ pour $\gamma H_1 \leq \frac{\Gamma}{4}$.

La largeur de raie croît donc avec γH_1 quand γH_1 est faible, pour atteindre une limite lorsque γH_1 devient très grand. De même, la répartition triangulaire déjà étudiée conduit à $\alpha \gg \sqrt{\frac{\gamma H_1}{2T_0}}$, résultat déjà obtenu.

Étude quantique : Guidés par le modèle classique précédent, nous prendrons comme axe de quantification la direction de \vec{H}_{eff} , ce qui correspond au changement de variables

$$\begin{cases} K_a = \cos \frac{\theta}{2} \lambda + \sin \frac{\theta}{2} \mu \\ K_b = \sin \frac{\theta}{2} \lambda - \cos \frac{\theta}{2} \mu. \end{cases} \quad (12)$$

Le système (1) conduit à :

$$\begin{cases} i \frac{d\lambda}{dt} = \gamma H_{\text{eff}} \lambda - \frac{i}{2} \frac{d\theta}{dt} \mu \\ i \frac{d\mu}{dt} = -\gamma H_{\text{eff}} \mu + \frac{i}{2} \frac{d\theta}{dt} \lambda. \end{cases} \quad (13)$$

Si la condition d'adiabaticité (9) est remplie le système se réduit à

$$\begin{cases} i \frac{d\lambda}{dt} = \gamma H_{\text{eff}} \lambda \\ i \frac{d\mu}{dt} = -\gamma H_{\text{eff}} \mu. \end{cases}$$

L'intégration de ce système est immédiate. Portée dans (12), elle conduit, avec les conditions initiales $\theta = 0$, $K_a = 1$, $K_b = 0$, à $P = |K_b(+\infty)|^2 = 0$.

Pour évaluer l'ordre de grandeur de l'erreur commise en négligeant le terme en $\frac{d\theta}{dt}$, on peut

résoudre le système (13) par approximations successives. La résolution au 1^{er} ordre conduit à :

$$P = |K_b(+\infty)|^2 = \frac{|I|^2}{4}$$

avec

$$I = \int_{-T}^{+T'} \frac{d\theta}{dt} e^{-2i\sigma(t)} dt$$

$$\sigma(t) = \int_{-T}^t \gamma H_{\text{eff}}(t') dt'$$

En remplaçant θ par sa valeur, on obtient :

$$I = \int_{-T}^{+T'} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (\gamma H_1)^2} \frac{d}{dt} (\gamma H_1) e^{-2i\sigma(t)} dt$$

$$= \int_{-T}^{+T'} \frac{\alpha}{[\alpha^2 + (\gamma H_1)^2]^{3/2}} \frac{d}{dt} (\gamma H_1) e^{-2i\sigma(t)} d\sigma(t).$$

Séparons l'intervalle $(-T, +T')$ en n intervalles dans lesquels la fonction $\frac{\alpha}{(\alpha^2 + (\gamma H_1)^2)^{3/2}}$ est monotone. L'application de la seconde formule de la moyenne (7) dans chacun de ces intervalles permet de majorer $|I|$, ce qui conduit à :

$$|I| < \sqrt{2}(n+1) \left| \frac{\alpha}{(\alpha^2 + (\gamma H_1)^2)^{3/2}} \frac{d}{dt} (\gamma H_1) \right|_{\text{max.}}$$

$$P < \frac{(n+1)^2}{2} \left\{ \left| \frac{\alpha}{(\alpha^2 + (\gamma H_1)^2)^{3/2}} \frac{d}{dt} (\gamma H_1) \right|_{\text{max.}} \right\}^2.$$

La correction du 1^{er} ordre à l'approximation d'ordre 0 est donc effectivement très faible si la condition (10) est satisfaite et si la variation de γH_1 est assez régulière pour que n ne soit pas trop grand.

VII. Conclusion. — En résumé, cette étude montre le rôle très important que joue la répartition du champ haute fréquence sur la forme de raie.

Dans de nombreux cas la raie présente près du centre une sorte de saturation ; sa largeur dans cette région ne dépend pas de γH_1 . Les ailes de la raie dépendent de γH_1 mais restent très faibles.

Les études théoriques faites avec l'hypothèse de répartition $H_1(t)$ en pulses rectangulaires ou avec des répartitions qui introduisent de brusques discontinuités dans γH_1 , donnent des largeurs incorrectes pour les grandes valeurs de γH_1 .

Manuscrit reçu le 3 avril 1956.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] KUSCH (P.), MILLMAN, RABI (I.), *Phys. Rev.*, 1940, **57**, 765.
 [2] BROSSEL (J.), CAGNAC (B.), KÄSTLER (A.), *J. Physique Rad.*, 1954, **15**, 6.
 [3] TORREY, *Phys. Rev.*, 1941, **59**, 293.
 [4] SALWEN (Harold), I. *Phys. Rev.*, 1955, **99**, 1274 ; II et III *Phys. Review*. 1956, **101**, 621-623.
 [5] KUSCH (P.), *Phys. Review*. 1956, **101**, 627.
 [6] RABI (I. I.), RAMSEY (N. F.), SCHWINGER (J.), *Rev. Mod. Physic*, 1954, **26**, 167.
 [7] WHITTAKER (E. T.) et WATSON (G. N.), *A course of Modern Analysis* (3^e édition), p. 66.

INFORMATION

Union Internationale de Cristallographie. — 4^{me} Assemblée Générale et Congrès International.

L'Union Internationale de Cristallographie, ayant accepté l'invitation du National Research Council of Canada, organise la 4^e Assemblée Générale et le Congrès International au Canada, du 10 au 17 juillet 1957. Le Congrès sera suivi de deux symposiums les 18 et 19 juillet. Au Congrès seront présentées des communications sur tous les aspects de la recherche en cristallographie. Les symposiums porteront sur les techniques physiques d'intérêt cristallographique et sur la diffraction électronique. Grâce à la coopération de Mc Gill University et de l'Université de Montréal, le Congrès se tiendra dans cette ville. Des excursions techniques sont prévues dans les provinces de Québec et de l'Ontario.

Le Comité Canadien National de Cristallographie fait fonction de Comité local pour l'organisation du Congrès. Il a préparé une brochure donnant les détails sur le programme et les formalités. Cette brochure peut être demandée à M. H. CURIEN, secrétaire de l'Association française de Cristallographie, Faculté des Sciences, 1, rue Victor-Cousin, Paris (5^e), France ; ou au Secrétaire Général de l'Union Internationale, Dr D. W. SMITS, Laboratorium voor Anorganische en Fysische Chemie, Bloemsingel, 10, Groningen, Hollande ; ou au Secrétaire du Comité canadien, Dr W. H. BARNES, Division of Physics, National Research Council, Ottawa 2, Ontario, Canada (porter sur l'enveloppe la mention «personal») ; ou au Président du Comité du Programme, Dr W. N. LIPSCOMB, School of Chemistry, University of Minnesota, Minneapolis, U.S.A.