

Chapitre 8

LA DYNAMIQUE DU SPIN.

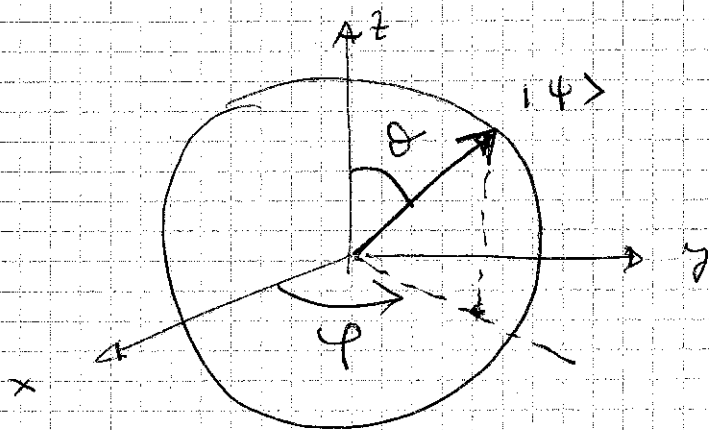
Dans ce chapitre nous allons étudier la dynamique du spin $1/2$ (moment magnétique de certains noyaux atomique notamment). Celle-ci constitue l'une des réalisations matérielles les plus importantes du bit quantique. En effet celui-ci est aisément manipulable grâce à des champs magnétiques dépendant du temps. La manipulation et le contrôle des moments magnétiques par des champs magnétiques dépendant du temps est à la base de la Résonance Magnétique Nucléaire (utilisée pour l'imagerie IRM et...). Le contrôle du spin est aussi à la base de la réalisation de portes quantiques. Nous verrons dans ce chapitre comment réaliser les portes de Hadamard et NOT. Pour ce qui concerne la porte importante CNOT il faut d'abord comprendre comment interagissent les paires de moments magnétiques. Ce sera l'objet du chapitre 9.

8.1. La sphère de Bloch.

Nous commençons par un rappel sur la sphère de Bloch déjà introduite au début du cours. Un qubit appartenant à l'espace de Hilbert \mathbb{C}^2 peut toujours être paramétré comme suit

$$|\psi\rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + \left(\sin \frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} |\downarrow\rangle.$$

Le vecteur complexe à deux composantes, peut être représenté sur une sphère, appelée sphère de Bloch, où θ est l'angle par rapport à la direction z et φ est l'angle dans le plan xy par rapport à x .



Il est utile de se remémorer (voir chap 1) la représentation des bases X , Y et Z c.-à-d. $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ et $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ sur cette sphère. La base Z consiste en deux vecteurs opposés le long de

l'axe z , la base X de deux vecteurs opposés le long de x et la base Y de deux vecteurs opposés le long de y .

Considérons la matrice

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{m} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z$$

où $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sont les trois matrices de Pauli et (m_x, m_y, m_z) est un vecteur unité $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$.

Soit aussi $m_x = \sin \theta \cos \varphi$, $m_y = \sin \theta \sin \varphi$ et $m_z = \cos \theta$. C'est à dire que \vec{m} est "identique" à la représentation de $|\psi\rangle$ sur la sphère de Bloch. On peut vérifier que

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{m} |\psi\rangle = (+1) |\psi\rangle$$

c'est à dire que $|\psi\rangle$ est vecteur propre de $\vec{\sigma} \cdot \vec{m}$ avec valeur propre $(+1)$. On peut donc se faire l'image que " $|\psi\rangle$ sur la sphère de Bloch est la projection du vecteur $\vec{\sigma}$ sur l'axe \vec{m} ".

Nous rappellerons aussi la formule (analogue à la formule d'Euler) démontrée aux exercices

$$\exp\left(i \frac{\alpha}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{m}\right) = \left(\cos \frac{\alpha}{2}\right) \mathbb{1} + i(\vec{\sigma} \cdot \vec{m}) \left(\sin \frac{\alpha}{2}\right).$$

(4)

Pour comprendre la signification de cette matrice 2×2 considérons un cas particulier. Prenons $\vec{m} = (0, 0, 1)$ (c.à.d. d'axe z) et appliquons la matrice sur $|\psi\rangle$.

$$\begin{aligned} \exp\left(i\frac{\alpha}{2}\sigma_z\right)|\psi\rangle &= \exp\left(i\frac{\alpha}{2}\sigma_z\right)\left\{\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right\} \\ &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\alpha}{2}}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}e^{-i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \\ &= e^{i\frac{\alpha}{2}}\left\{\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i(\varphi-\alpha)}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right\}. \end{aligned}$$

Le préfacteur $e^{i\frac{\alpha}{2}}$ n'a pas de signification physique puisque c'est une phase globale. Le nouveau vecteur sur la sphère de Bloch fait toujours un angle θ avec z et un angle $(\varphi-\alpha)$ dans le plan xy avec l'axe x . Ainsi, l'opération $\exp\left(i\frac{\alpha}{2}\sigma_z\right)$ représente une rotation d'angle $(-\alpha)$ autour de l'axe z .

Plus généralement la matrice $\exp\left(i\frac{\alpha}{2}\vec{\sigma} \cdot \vec{m}\right)$ représente une rotation d'angle $(-\alpha)$ et d'axe \vec{m} sur la sphère de Bloch. Nous allons voir que la dynamique de l'électron dans un champ \vec{B} constant fait intervenir de telles rotations (autour de \vec{B} qui joue le rôle de \vec{m} essentiellement).

8.2, Hamiltonien du spin dans un champ magnétique

Nous avons vu au début du cours que l'énergie d'interaction d'un moment magnétique \vec{M} avec un champ magnétique \vec{B} est donnée par (comme en physique classique)

$$E = - \vec{M} \cdot \vec{B}$$

En physique quantique l'observable \vec{M} devient une matrice. Pour les moments magnétiques de spin $1/2$ (comme celui de l'électron, du proton, de certains noyaux atomiques etc...) on a

$$\vec{M} = \frac{g\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

où $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ est le vecteur dont les composantes sont constituées par les trois matrices de Pauli. Ainsi l'énergie d'interaction d'un spin $1/2$ dans un champ magnétique est donnée par une matrice 2×2 (hermitienne, c'est une observable) appelée Hamiltonien

$$H = - \frac{g\hbar}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

⑥

En composantes, cette matrice est explicitement,

$$H = -\frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}$$

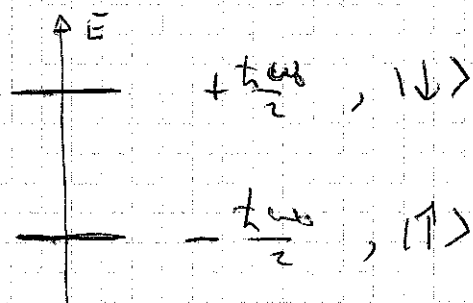
Considérons maintenant un champ magnétique constant (qui ne varie pas avec le temps). On peut toujours choisir l'axe z le long du vecteur $\vec{B} = (0, 0, B)$. Par conséquent

$$H = -\frac{g\hbar}{2} B \sigma_z \equiv -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

où $\hbar\omega_0 = g\hbar B$ par définition. Ici ω_0 est l'unité d'une fréquence [s^{-1}] et s'appelle la fréquence de Larmor. Les deux valeurs propres de H sont $-\frac{\hbar\omega_0}{2}$

et $+\frac{\hbar\omega_0}{2}$ et les vecteurs propres correspondants sont $|\downarrow\rangle$

et $|\uparrow\rangle$. On peut se représenter ces valeurs propres sur un diagramme donnant les "niveaux d'énergie" du système



les systèmes dont l'Hamiltonien possède un spectre d'énergie de ce type s'appellent des "systèmes à deux niveaux". Il existe plusieurs types de systèmes à deux niveaux (exactes ou approximatifs) dans la nature. Ils peuvent tous être mathématiquement modélisés par l'"Hamiltonien d'un spin dans un champ magnétique", et donc le formalisme décrit dans ce chapitre dépasse de loin le cadre de la dynamique des moments magnétiques dans un champ magnétique.

Nous allons considérer aussi des champs magnétiques variables dans le temps du type

$$\vec{B} = (0, 0, B_0) + (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, 0)$$

Il s'agit d'un champ auquel on a ajouté une partie tournante dans le plan xy . L'Hamiltonien du spin dans ce champ est donné par la matrice

$$H = -\frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 (\cos \omega t - i \sin \omega t) \\ B_1 (\cos \omega t + i \sin \omega t) & B_0 \end{pmatrix}$$

En introduisant les matrices

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

on peut réécrire et Hamiltonien sous la forme

$$H = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z - \frac{\hbar\omega_1}{2} (\sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{+i\omega t})$$

Notons que $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ ne sont plus des états propres à cause du terme dépendant du temps. En fait ce terme est responsable de transitions quantiques entre ces états car

$$\sigma_+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \quad \text{et} \quad \sigma_+ |\uparrow\rangle = 0$$

$$\sigma_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \text{et} \quad \sigma_- |\downarrow\rangle = 0$$

Non alors voir que les transitions entre les niveaux d'énergie de la partie $-\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z$ sont

explicitée dans la RMN et la réalisation des poles quantiques.

8.3. La précession de Larmor.

Dans ce paragraphe nous étudions l'évolution temporelle d'un état $|\psi\rangle = \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow\rangle$ dans un champ magnétique constant $\vec{B} = (0, 0, B_0)$ orienté dans la direction z.

D'après les postulats de la mécanique quantique cette évolution temporelle est donnée par une matrice unitaire qui dépend du temps

$$U(t, 0) |\psi\rangle \equiv |\psi(t)\rangle$$

telle que $U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$.

(Ici $U(t, s)$ signifie évolution de l'instant s à l'instant t .) Cette matrice est la solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, 0) = H U(t, 0)$$

Il s'agit donc de résoudre cette équation de Schrödinger.

La résolution est aisée si H ne dépend pas du temps t . En effet il est facile de vérifier qu'alors

$$U(t,0) = \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} H\right)$$

est solution. Par contre si H dépend du temps la solution est plus compliquée et en particulier cette formule simple n'est plus valable.

Pour le cas du champ $\vec{B} = (0, 0, B_0)$ constant on a $H = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z$ indépendant du temps et donc :

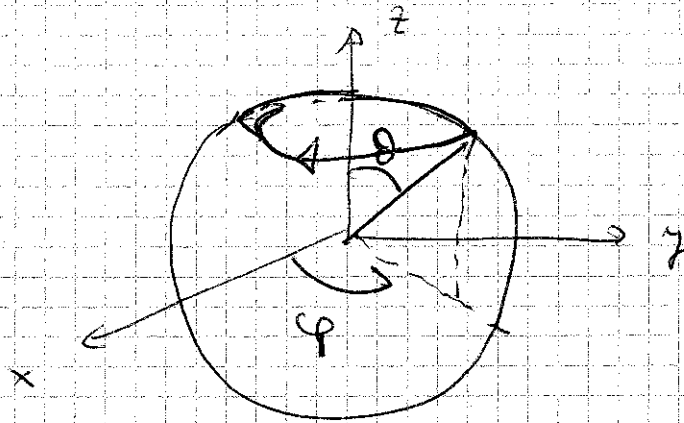
$$U(t,0) = \exp\left(i \frac{t\omega_0}{2} \sigma_z\right).$$

On reconnaît ici la matrice de rotation autour de l'axe z et d'angle $(-t\omega_0)$. Ainsi l'état à l'instant t est

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(i \frac{t\omega_0}{2} \sigma_z\right) |\psi(0)\rangle \\ &= \exp\left(i \frac{t\omega_0}{2} \sigma_z\right) \left\{ \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \right\} \\ &= \exp\left(i \frac{t\omega_0}{2}\right) \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\varphi} \exp\left(-i \frac{t\omega_0}{2}\right) \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \\ &= \exp\left(i \frac{t\omega_0}{2}\right) \left\{ \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \exp\left(i(\varphi - t\omega_0)\right) \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \right\}. \end{aligned}$$

L'angle φ évolue comme $\varphi - t\omega_0$ avec le temps. Sur la sphère de Bloch on a un mouvement appelé précession de Larmor autour de z (l'axe de \vec{B}) et à la fréquence de

la précession de Larmour est ω_0 lui-même (la période temporelle étant $\frac{2\pi}{\omega_0} = T_0$) .



8.4. Oscillations de Rabi.

Non allons maintenant nous attaquer à la dynamique du spin dans le champ $\vec{B} = (0, 0, B_0) + B_1 (\cos \omega t, \sin \omega t, 0)$ tournant.

L'équation de Schrödinger donnant l'opérateur d'évolution

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, 0) = H(t) U(t, 0)$$

est toujours valable avec ici

$$H(t) = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z - \frac{\hbar\omega_1}{2} \left(\sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{i\omega t} \right)$$

Néanmoins l'équation de Schrödinger est moins aisé à résoudre car $H(t)$ dépend du temps. Pour nous affranchir de cette difficulté nous faisons un changement de référentiel. Dans le nouveau référentiel l'Hamiltonien est indépendant du temps. Il est facile de calculer l'opérateur d'évolution. Soit :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \exp\left(\frac{i\hbar K}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle$$

avec $K = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix}$. Ici l'exponentielle

est la matrice de rotation d'angle $(t\omega)$ autour de z.

Puisque $|\psi(t)\rangle = U(t,0) |\psi(0)\rangle$ au frame

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= e^{\frac{i t K}{\hbar}} U(t,0) |\psi(0)\rangle \\ &\equiv \tilde{U}(t,0) |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

Ainsi le nouvel opérateur d'évolution dans le nouveau référentiel est $\tilde{U}(t,0) = e^{\frac{i t K}{\hbar}} U(t,0)$. Pour obtenir l'équation de Schrödinger on calcule :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{U} &= i\hbar \left\{ \frac{i}{\hbar} K e^{\frac{i t K}{\hbar}} U + e^{\frac{i t K}{\hbar}} H(t) U \right\} \\ &= i\hbar \left\{ \frac{i}{\hbar} K \tilde{U} + e^{\frac{i t K}{\hbar}} H(t) e^{-\frac{i t K}{\hbar}} \tilde{U} \right\} \\ &= \left\{ -K + e^{\frac{i t K}{\hbar}} H(t) e^{-\frac{i t K}{\hbar}} \right\} \tilde{U} \\ &\equiv \tilde{H}(t) \tilde{U} \end{aligned}$$

le nouvel Hamiltonien est \tilde{H} . On le calcule facilement. En effet

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

ce qui donne finalement,

$$\tilde{H} = \frac{\hbar\delta}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\omega_1}{2}\sigma_x$$

avec $\delta = \omega - \omega_0$. L'opérateur d'évolution \tilde{U} est donc

$$\tilde{U} = \exp\left(-\frac{it}{\hbar}\tilde{H}\right) = \exp\left\{i\frac{t}{2}(\delta\sigma_z - \omega_1\sigma_x)\right\}$$

On peut calculer cette matrice à partir de la formule "d'Euler généralisée". À partir de là on déduit

$$U = e^{-\frac{it}{\hbar}K} \tilde{U}$$

L'opérateur d'évolution final obtenu sans aucune approximation est :

$$U(t,0) = \begin{pmatrix} u_{\uparrow\uparrow} & u_{\uparrow\downarrow} \\ u_{\downarrow\uparrow} & u_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

avec les 4 éléments de matrice :

$$u_{\uparrow\uparrow} = e^{i\frac{t\omega}{2}} \left\{ \cos\frac{t}{2}\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} + i\frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}} \sin\frac{t}{2}\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right\}$$

$$u_{\uparrow\downarrow} = - \frac{i\omega_1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}} e^{i\frac{t\omega}{2}} \sin \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}$$

$$u_{\downarrow\uparrow} = - \frac{i\omega_1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}} e^{-i\frac{t\omega}{2}} \sin \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}$$

$$u_{\downarrow\downarrow} = e^{-i\frac{t\omega}{2}} \left\{ \cos \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} - i \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}} \sin \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right\}$$

Nous avons complètement résolu le problème de la dynamique du vecteur d'état $|\psi\rangle$ dans un champ magnétique du type $(B_x \cos \omega t, B_x \sin \omega t, B_0)$.

A partir de l'opérateur d'évolution on peut calculer les probabilités de transitions suivantes

$$P_{|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle}(t) = |\langle \downarrow | U(t) | \uparrow \rangle|^2 = |u_{\uparrow\downarrow}|^2$$

$$P_{|\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle}(t) = |\langle \uparrow | U(t) | \uparrow \rangle|^2 = |u_{\uparrow\uparrow}|^2$$

La première probabilité représente la probabilité d'observer l'état $|\downarrow\rangle$ à l'instant t , lorsque l'état initial est $|\uparrow\rangle$. C'est donc la probabilité que le spin soit "retourné". La seconde est la probabilité que le spin reste inchangé.

On trouve

$$\begin{cases} P_{\uparrow \rightarrow \downarrow}(t) = \frac{\omega_1^2}{\delta^2 + \omega_1^2} \left(\sin \left(\frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right) \right)^2 \\ P_{\uparrow \rightarrow \uparrow}(t) = \left(\cos \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right)^2 + \frac{\delta^2}{\delta^2 + \omega_1^2} \left(\sin \frac{t}{2} \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right)^2 \end{cases}$$

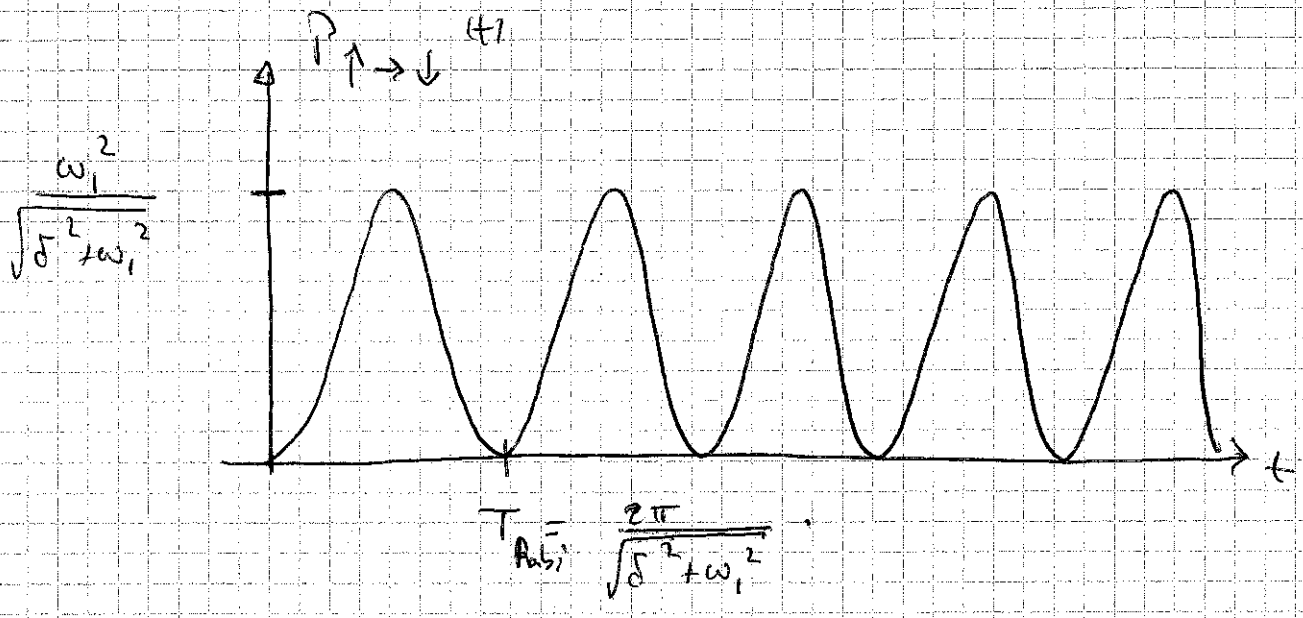
On vérifie bien que ces deux probabilités de ne somment à 1, comme il se doit.

Le graphique suivant représente la probabilité de transition $P_{\uparrow \rightarrow \downarrow}(t)$ en fonction du temps. C'est une ~~cos~~ fonction

périodique de période $T_{\text{Rabi}} = \frac{2\pi}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}}$ et de hauteur

$\frac{\omega_1^2}{\delta^2 + \omega_1^2}$. Nous voyons que l'amplitude est maximale

lorsque $\delta = 0$ c.à.d. $\omega = \omega_0$, lorsque la fréquence du champ tournant est égale à la fréquence de Larmor. Lorsque $\delta \gg \omega_1$ (on parle de detuning) la probabilité de transition est faible.



8.5. Réalisations des portes quantiques.

Les oscillations de Rabi, expliquées au cas $\delta = 0$ ($\omega = \omega_0$ tuning parfait entre la fréquence de rotation du champ tournant et la fréquence de Larmor) permettent de réaliser certaines portes à 1 qubit. Ici nous discuterons la porte NOT et de Hadamard.

8.5.1. la porte NOT.

En prenant $\delta = 0$ et $t = \frac{T_{Rabi}}{2} = \frac{\pi}{\omega_1}$ on voit que $P_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = 1$. Ainsi, le spin est retourné avec probabilité 1 par un champ tournant d.p. $\omega = \omega_0$ et enclenché pendant un temps $t = \frac{\pi}{\omega_1}$. Un tel champ s'appelle

un " π -pulse" dans le langage de la RMN.
 le temps $t = \frac{\pi}{\omega_1}$ est en gros la durée de basculement
 du spin.

Pour vérifier que l'opérateur d'évolution unitaire
 correspond bien (est équivalent) à la porte NOT,
 il est commode d'examiner l'évolution dans le référentiel
 tournant

$$\tilde{U} = \exp\left(i \frac{t}{2} (\delta \sigma_z + \omega_1 \sigma_x)\right).$$

Pour $\delta = 0$ et $t = \frac{\pi}{\omega_1}$ on trouve

$$\tilde{U} = \exp\left(i \frac{\pi}{2} \sigma_x\right) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Il s'agit d'une matrice de rotation d'angle π autour
 de l'axe x . Le vecteur $|\uparrow\rangle$ est bien transformé en
 $|\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ est bien transformé en $|\uparrow\rangle$.

8.5.2 La porte de Hadamard,

Cette fois on fixe $\delta = 0$ (tuning parfait $\omega = \omega_0$)
 et on enclenche le champ tournant ($B_1 \cos \omega t$, $B_1 \sin \omega t$, 0)
 pendant un temps $t = \frac{T_{\text{Rabi}}}{4} = \frac{\pi}{2\omega_1}$. Notez que cette

divisée est la moitié que celle de la porte NOT. On trouve
 alors $P_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = \frac{1}{2}$ et $P_{\uparrow \rightarrow \uparrow} = \frac{1}{2}$. Plus
 précisément dans le référentiel tournant

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= \exp\left(i \frac{t}{2} (\delta \sigma_z + \omega_1 \sigma_x)\right) \\ &= \exp\left(i \frac{\pi}{4} \sigma_x\right) \\ &= \left(\cos \frac{\pi}{4}\right) \mathbb{1} + i \left(\sin \frac{\pi}{4}\right) \sigma_x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Cette matrice effectue le basculement de $|\uparrow\rangle$ vers

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) \text{ et le basculement de } |\downarrow\rangle \text{ vers } \frac{1}{\sqrt{2}} (i|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle).$$

Cette opération est ^{physiquement} équivalente à une porte de

$$\text{Hadamard, } H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$