
Solution de la série 2 Traitement quantique de l'information II

Exercice 1 Résonance Magnétique Nucléaire

Les valeurs propres de l'Hamiltonien (les niveaux d'énergies possibles) sont égales à $E_{\uparrow} = -\frac{\hbar\omega_0}{2}$, $E_{\downarrow} = +\frac{\hbar\omega_0}{2}$ et leurs vecteurs propres associés sont $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$.

1. Les fractions N_i/N sont égales à :

$$\frac{N_i}{N} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

Comme $N_{\uparrow} + N_{\downarrow} = N$, on peut dès lors écrire le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} N_{\uparrow} &= \frac{N}{Z} e^{\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \\ N_{\downarrow} &= \frac{N}{Z} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \\ N &= \frac{N}{Z} \left(e^{\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} + e^{-\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \right) = 2 \frac{N}{Z} \cosh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \end{aligned}$$

On trouve finalement :

$$\begin{aligned} N_{\uparrow} &= \frac{N}{2 \cosh \frac{\hbar\omega_0}{2kT}} e^{\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \\ N_{\downarrow} &= \frac{N}{2 \cosh \frac{\hbar\omega_0}{2kT}} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \end{aligned}$$

2. Une particule du groupe N_{\uparrow} se trouve dans l'état $|\uparrow\rangle$ et la valeur moyenne de son aimantation (c'est un vecteur) est

$$\langle \uparrow | \vec{\mu} | \uparrow \rangle = \frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \\ \langle \uparrow | \sigma_y | \uparrow \rangle \\ \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pour une particule du groupe N_{\downarrow} , dans l'état $|\downarrow\rangle$, on trouve similairement

$$\langle \downarrow | \vec{\mu} | \downarrow \rangle = -\frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Le vecteur aimantation \vec{M} de l'échantillon se calcule en sommant les contributions (les aimantations) des particules N_\downarrow et N_\uparrow et on obtient :

$$\begin{aligned}\vec{M} &= N_\uparrow \langle \uparrow | \vec{\mu} | \uparrow \rangle + N_\downarrow \langle \downarrow | \vec{\mu} | \downarrow \rangle = \frac{g\hbar}{2} (N_\uparrow - N_\downarrow) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{g\hbar N}{4 \cosh \frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \left(e^{\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} - e^{-\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{g\hbar N}{2} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

L'aimantation est dirigée selon l'axe z dans le même sens que \vec{B}_0 . On remarque aussi que si la température devient grande $T \rightarrow \infty$, alors $\tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT}$ devient nul et l'aimantation totale devient nulle. Si au contraire $T \rightarrow 0$ la $\tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT}$ vaut 1 et l'aimantation est maximum.

3. Après le $\frac{\pi}{2}$ pulse, on est dans une situation où une quantité de particules N_\uparrow se trouve dans l'état $|+\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ et une quantité N_\downarrow se trouve dans l'état $|-\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$. On a vu en cours que les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ soumis au champs \vec{B}_0 vont évoluer au cours du temps (à une phase globale près) de la façon suivante :

$$\begin{aligned}|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + e^{i\omega_0 t} |\downarrow\rangle) \\ |-\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - e^{i\omega_0 t} |\downarrow\rangle)\end{aligned}$$

On recalcule l'aimantation $\vec{M}(t)$ de la même manière qu'au point précédent à ceci près que les quantités dépendent du temps. On trouve pour les particules du groupe N_\uparrow

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2} (\langle \uparrow | + e^{-i\omega_0 t} \langle \downarrow |) \vec{\mu} (|\uparrow\rangle + e^{i\omega_0 t} |\downarrow\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle \uparrow | \vec{\mu} | \uparrow \rangle + e^{-i\omega_0 t} \langle \downarrow | \vec{\mu} | \uparrow \rangle + e^{i\omega_0 t} \langle \uparrow | \vec{\mu} | \downarrow \rangle + \langle \downarrow | \vec{\mu} | \downarrow \rangle) \\ &= \frac{g\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t} \\ ie^{-i\omega_0 t} - ie^{i\omega_0 t} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \omega_0 t \\ \sin \omega_0 t \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

De la même manière pour une particule du groupe N_\downarrow on trouve :

$$-\frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \omega_0 t \\ \sin \omega_0 t \\ 0 \end{pmatrix}$$

On a alors que l'aimantation totale de l'échantillon est à présent :

$$\vec{M}(t) = \frac{g\hbar N}{2} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \begin{pmatrix} \cos \omega_0 t \\ \sin \omega_0 t \\ 0 \end{pmatrix}$$

L'aimantation est dirigée dans le plan xy et tourne dans ce plan avec une fréquence ω_0 .

4. On rappelle que le vecteur \vec{S} est un vecteur perpendiculaire à la surface (dans notre cas \vec{S} est orienté selon l'axe y) et de norme égale à l'aire de la surface. Le flux dans une spire est alors

$$\begin{aligned}\Phi(t) &= \vec{S} \cdot \vec{M} \\ &= \frac{g\hbar N}{2} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \sin \omega_0 t\end{aligned}$$

La tension aux extrémités d'une spire de la bobine est alors (par la loi de Faraday) :

$$\begin{aligned}u(t) &= -\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t} \\ &= -\frac{g\hbar N}{2} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \cos \omega_0 t\end{aligned}$$

Comme les spires sont montées en séries, la tension totale $U(t)$ dans la bobine est

$$U(t) = -\frac{g\hbar Nn}{2} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \cos \omega_0 t$$

D'après la loi d'Ohm le courant est alors

$$I(t) = U(t)/R = -\frac{g\hbar Nn}{2R} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \cos \omega_0 t$$

5. Avec l'indication, la transformée de Fourier du courant $I(t)$ est

$$\mathcal{F}(I)(\omega) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{g\hbar Nn}{2R} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} (\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0))$$

On devrait donc observer deux pics et leur position nous renseigne sur la valeur de ω_0 (ils sont centré en $\pm\omega_0$). Ensuite comme R, n, T (et évidemment g, \hbar, k) sont connus, l'amplitude du pic nous fournis directement la valeur de N : le nombre de particules de l'échantillon.

6. On rappelle que la transformée de Fourier d'un produit de fonction est la convolution des transformées de Fourier de ces fonctions i.e.

$$\mathcal{F}(f \cdot g)(\omega) = \int \mathcal{F}(f)(\nu) \cdot \mathcal{F}(g)(\omega - \nu) d\nu$$

La convolution avec une fonction delta étant triviale on obtient finalement :

$$\mathcal{F}(I_r)(\omega) = -\frac{g\hbar Nn}{2\sqrt{2\pi}R} \tanh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \left(\frac{\tau}{1 + (\omega + \omega_0)^2 \tau^2} + \frac{\tau}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau^2} \right)$$

Les deux pics sont toujours centrés en $\pm\omega_0$ mais la hauteur est à présent multipliée par τ . Pour connaître τ , il faut mesure la largeur du pic à la mi-hauteur. Cette largeur vaut $\frac{2}{\tau}$. Ensuite il devient possible de retrouver N comme dans le point précédent.