Série 2
Traitement quantique de l'information II

Exercice 1 *Résonance Magnétique Nucléaire.*

Dans un échantillon de volume V, on aimerait par exemple déterminer la densité $\rho = \frac{N}{V}$ d'un certain type de molécules qu'il contient. Ici N est le nombre total de ces molécules dans l'échantillon. En RMN on agit sur les moments magnétiques de certains noyaux d'atomes constituant ces molécules. On admettra que le problème revient à déterminer le nombre de moments magnétiques nucléaires (et qu'on peut en déduire ρ).

Pour ce faire on soumet tout d'abord l'échantillon à un fort champ magnétique $\vec{B}_0$ dirigé sur l'axe z (par convention). L'hamiltonien pour un moment magnétique $\vec{\mu} = \frac{g\hbar}{2}\vec{\sigma}$ (le facteur gyromagnétique g est une constante cactérisant les noyaux sur lesquels on agit) peut s'écrire comme

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\hbar\omega_0\sigma_z$$

où $\omega_0 = gB_0$. 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. Une fois le champ magnétique $\vec{B}_0$ enclenché, l'échantillon va progressivement se thermaliser. Une fois l'équilibre thermique atteint, une quantité de moments magnétiques $N_\uparrow$ se trouvera dans l'état propre d'énergie $E_\uparrow$ et le reste des moments magnétiques $N_\downarrow$ sera dans l'état d'énergie $E_\downarrow$. Exprimez $N_\uparrow$ et $N_\downarrow$ en fonction de N et $\hbar\omega_0$, sachant qu'à l'équilibre thermique, la fraction de moments magnétiques dans l'état d'énergie E_i est égale à

$$\frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{Z}, \qquad Z = e^{-\frac{E_\uparrow}{kT}} + e^{-\frac{E_\downarrow}{kT}}$$

   où k est la constant de Boltzmann et T la température.

2. L'observable aimantation pour un moment magnétique est $\vec{\mu} = \frac{g\hbar}{2}\vec{\sigma}$ oú $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Calculez la valeur moyenne de l'aimantation pour une particule du groupe $N_\uparrow$ et celle du groupe $N_\downarrow$, c.a.d :

$$m_\uparrow = \langle\uparrow|\vec{\mu}|\uparrow\rangle, \qquad m_\downarrow = \langle\downarrow|\vec{\mu}|\downarrow\rangle.$$

   Puis calculez l'aimantation macroscopique totale $\vec{M}$ de l'échantillon.

3. A présent on fait subir à l'échantillon un $\frac{\pi}{2}$-pulse. C'est à dire qu'on enclenche un champ magnétique $\vec{B}_1(t)$ tournant dans le plan xy à la fréquence de résonance $\omega = \omega_0$

pendant un temps $t = \frac{\pi}{2\omega_1}$ (où $\omega_1 = gB_1/2$). En cours il a été démontré que ce processus est essentiellement équivalent à une porte Hadamard i.e.

$$
\begin{aligned}
|\uparrow\rangle &\longmapsto |+\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right) \\
|\downarrow\rangle &\longmapsto |-\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle\right)
\end{aligned}
$$

Pour les temps $t > \frac{\pi}{2\omega_1}$ on arrête le champ $\vec{B}_1(t)$ et seul le champ $\vec{B}_0$ reste actif. Ecrire comment les états initialement $|+\rangle$ et $|-\rangle$ vont évoluer au cours du temps et calculez l'aimantation totale $\vec{M}(t)$ pour des temps $t > \frac{\pi}{2\omega_1}$.

4. Par la suite, on place une bobine électrique de section S, possédant n spires, et résistance R, autour de l'échantillon dans le plan xy et orientée dans la direction y. Trouvez l'expression du courant électrique $I(t)$ induit dans la bobine. On rappelle la loi de Faraday pour la tension induite induite

$$
U(t) = -n \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t}
$$

où le flux $\Phi(t) = \vec{S} \cdot \vec{M}$.

5. Effectuez la transformée de Fourier du courant (signal) $I(t)$ et dessinez cette fonction. On rappelle que la transformée de Fourier de $\cos \omega_0 t$ est égale à

$$
\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)\right)
$$

6. En pratique le signal est atténué car il y a des processus de re-thermalisation des moments magnétiques nucléaires, et le système va retourner vers l'équilibre thermique sur une échelle de temps τ. Le signal réel $I_r(t)$ peut s'écrire comme $I_r(t) = I(t)\, e^{-|t|/\tau}$. Calculez la transformée de Fourier de $I_r(t)$ et dessinez cette fonction. On rappelle que la transformée de Fourier de $e^{-|t|/\tau}$ est égale à

$$
\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2}
$$