Mécanique quantique – L2
25 novembre 2016

Test de mécanique quantique

---

1 Particule dans un puits carré infini

On considère une particule de masse m confiné dans un potentiel $V(x)$ tel que $V(x) = 0$ pour $x \in [0, L]$ et $V(x) = +\infty$ partout ailleurs.

1. Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire satisfaite par la fonction d'onde $\psi(x)$ et l'énergie $E > 0$ dans l'intervalle $x \in [0, L]$.
2. Pourquoi a-t-on la condition $\psi(0) = \psi(L) = 0$?
3. Déduire des deux questions précédentes que la fonction d'onde du n-ème niveau s'écrit
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right).$$
4. En déduire l'énergie E_n de cet état.
5. Quelle relation existe entre $\psi_n(x)$ et $\psi_n(L-x)$? Justifier. En déduire la valeur de $\langle \widehat{X} \rangle$ lorsque le système est dans un état $|\psi_n\rangle$.
6. On place le système dans un état $|\psi(0)\rangle = \alpha|\psi_n\rangle + \beta|\psi_{n+1}\rangle$.
   (a) Quelle condition les coefficients α et β doivent-ils satisfaire pour que l'état soit normé ?
   (b) Donner l'expression formelle de $|\psi(t)\rangle$ à l'aide des énergies E_n.
   (c) Calculer $\langle \widehat{H} \rangle(t)$. Commentaire ?
   (d) Calculer $\langle \widehat{X} \rangle(t)$ à l'aide de l'élément de matrice $\langle \psi_n|\widehat{X}|\psi_{n+1}\rangle$ qu'on ne cherchera pas à calculer explicitement. Montrer que cette valeur moyenne oscille à une fréquence que l'on exprimera en fonction des paramètres du problème.
7. On prépare cette fois le système dans une superposition de la forme :
$$\langle \phi(0) \rangle = \sum_{i=-K}^{K} \alpha_i \langle \psi_{n+i} \rangle$$
   Avec $n >> 1, n >> K$.
   (a) Reprendre 6(a) et 6(d), et montrer que $\langle \widehat{X} \rangle(t)$ n'est plus sinusoïdale mais reste approximativement périodique. Calculer la période correspondante T_n, et l'écrire en fonction de E_n.
   (b) Montrer que le résultat est identique à celui du système classique correspondant. Justifier.

2 Nanomécanique

On considère un nano-diamant contenant un centre NV (un atome de carbone a été remplacé par un atome d'azote) attaché à une nano-tige flexible en SiC. Le système est immergé dans un gradient de champ magnétique intense. Le centre NV du nano-cristal peut se modéliser par un simple spin 1/2 et la tige par un oscillateur harmonique de masse M et de fréquence Ω. En présence de champ magnétique on peut donc modéliser le système par le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{z}^2 + g\mu_b\hat{\vec{B}}.\hat{\vec{\sigma}} \tag{1}$$

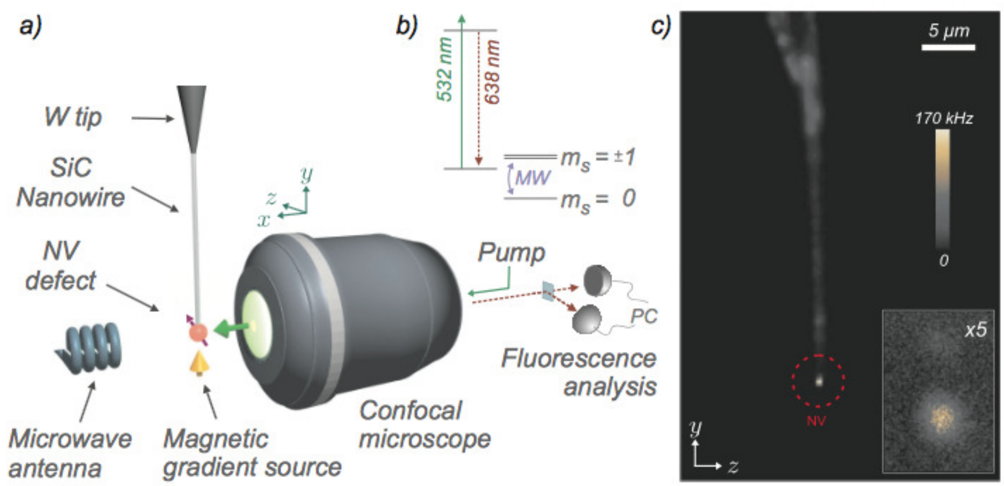

FIGURE 1 – **a**) L'expérience en question. **b**) Les états internes du centre NV. Les états $ms = \pm 1$ sont les deux états que l'on peut traiter comme ceux d'un spin 1/2. A l'aide d'un pulse RF on peut passer d'un état à l'autre ou à un troisième état $ms = 0$. **c**) Fluorescence du système. La tâche brillante correspond à la flurorescence du centre NV (unique) du nano-diamant.

1. Justifier brièvement la forme du Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$.

Le champ magnétique prend la forme : $\vec{B} = B_0\vec{e}_z$.

2. Pourquoi peut-on chercher les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$ sous la forme $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\pm\rangle_z$, où $|\phi\rangle$ et $|\pm\rangle_z$ sont respectivement des états de propres de $\hat{\mathcal{H}}_{tige} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{z}^2$ et de $\hat{\mathcal{H}}_{spin} = g\mu_b\hat{\vec{B}}.\hat{\vec{\sigma}}$?
3. Quelles sont les énergies propres de $\hat{\mathcal{H}}$?

Le champ magnétique prend dorénavant la forme : $\vec{B} = bz\vec{e}_z$. Le spin du nanodiamant est donc maintenant couplé à la position de la tige.

4. Quel va être l'effet du champ magnétique sur la tige ?
5. Pourquoi peut-on chercher les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$ comme états propres de $\hat{\sigma}_z$?

6. On doit donc chercher les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$ comme $|\psi\rangle = |\phi\rangle_\pm \otimes |\pm\rangle_z$. Montrer que $|\phi\rangle_\pm$ doit être état propre de

$$\hat{\mathcal{H}}_\pm = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 \left(\hat{z} \pm z_0\right)^2 - \frac{1}{2}M\Omega^2 z_0^2 \tag{2}$$

7. Donner l'expression de z_0. Donner son ordre de grandeur pour $b = 4500T.m^{-1}$, avec $g \simeq 2$ et $\mu_b = 9.27 \times 10^{-24} J.T^{-1}$.

On introduit donc les opérateurs annihilation

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{z} \pm z_0}{l_{oh}} + i\frac{\hat{p}}{p_{oh}}\right) \tag{3}$$

et création

$$\hat{a}_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{z} \pm z_0}{l_{oh}} - i\frac{\hat{p}}{p_{oh}}\right) \tag{4}$$

avec $l_{oh} = \sqrt{\hbar/M\Omega^2}$ et $p_{oh} = \sqrt{M\hbar\Omega}$.

8. Sans calculs, exprimer $\hat{\mathcal{H}}_\pm$ à l'aide de ces opérateurs.
9. Quelles sont les énergies propres de $\hat{\mathcal{H}}_\pm$? De $\hat{\mathcal{H}}$? Quelles sont leur dégénérescence ?
10. Soient $|n\rangle_\pm$ les états propres de $\hat{\mathcal{H}}_\pm$. Pour plus de commodité on notera désormais $|n_{\epsilon_i}, \epsilon_j\rangle = |n\rangle_{\epsilon_i} \otimes |\epsilon_j\rangle_z$. Que vaut $< \hat{z} >$ pour $|\psi\rangle = |0_+, +\rangle$? Pour $|\psi\rangle = |n_+, +\rangle$?
11. L'état $\alpha|0_+, +\rangle + \beta|0_-, -\rangle$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ est il un état propre de $\hat{\mathcal{H}}$? Que vaut $< \hat{z} >$ pour cet état ?
12. On suppose qu'on a préparé le système dans l'état $|0_+, +\rangle$. A t=0, à l'aide d'un pulse radio fréquence on renverse instantanément le spin du centre NV pour obtenir l'état $|\psi(t = 0)\rangle = |0_+, -\rangle$. Calculer $\hat{a}_-|0_+, -\rangle$, que reconnaît on ?
13. Calculer $|\psi(t)\rangle$. Que vaut $< \hat{z} > (t)$? Commenter.

Dans l'expérience, on fait osciller sinusoïdalement la tige tandis que le spin du centre NV est dans l'état $|+\rangle_z$. A l'aide d'une antenne RF on peut faire passer l'état interne du centre NV vers un troisième niveau lorsque la fréquence RF est résonante avec la transition. En pratique cela se traduit par une chute de la fluorescence du nanodiamant. Lorsque la tige n'oscille pas le spectre en fluorescence donne une simple Lorentzienne. En revanche lorsque l'amplitude des oscillations devient importante on observe que le spectre s'élargit et possède une double structure (voir fig.2).

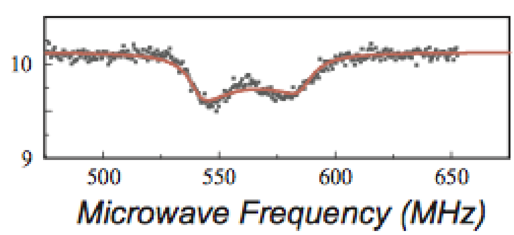

Figure 2 – Spectre de fluorescence du centre NV pour un gradient $b = 4500T.m^{-1}$

14. Comment interprétez-vous cet effet ? En déduire une estimation de l'amplitude d'oscillation de la tige.