

LP00 – Titre

29 juin 2020

Laura Guislain & Pascal Wang

Niveau :

Commentaires du jury

Bibliographie

✦ *Le nom du livre, l'auteur*¹

→ Expliciter si besoin l'intérêt du livre dans la leçon et pour quelles parties il est utile.

Prérequis

➤ prérequis

Expériences

✦ Biréfringence du quartz

Table des matières

1	Présentation d'un système à deux niveaux	3
1.1	La molécule NH ₃	3
1.2	Système à deux niveaux	3
1.3	Evolution temporelle	4
2	Couplage électrique, MASER	4
2.1	Couplage de NH ₃ avec un champ électrique statique	4
2.2	Champ oscillant, émission stimulée	5
2.3	Réalisation technique du MASER	6
3	Horloges atomiques	8
3.1	Horloge atomique	8
3.2	Franges de Ramsey	9

Préparation

A faire : Programme python inversion ammoniac, Bétonner l'horloger atomique. savoir faire les calculs sans regarder https://en.wikipedia.org/wiki/Ramsey_interferometry Trouver un graphe d'oscillations rabi (Meekohf et al. de laser matière par ex). Lire l'article de NIST atomic clock pour les franges de ramsey à commenter.

Passage : 🚫 il faut être clair sur quelle base on projette le Hamiltonien!

Questions : émission spontanée, stimulée (origine, caractéristiques, cf. LP laser), comment sélectionner des vitesses (impulsion π et effet Doppler), sphère de Bloch, 🚫 analogie avec la RMN!!,

Compléments Laura

- <https://www.youtube.com/watch?v=JZjEWDFcF7w> vidéo inversion ammoniac

Introduction

Objectif Dans une leçon précédente, on a vu le formalisme des fonctions d'ondes en mécanique quantique, qu'on a utilisé pour étudier le problème de la molécule d'ammoniac. On va poursuivre l'étude de ce cas d'espèce par la mécanique des matrices, à l'aide du formalisme de Dirac, en se ramenant à un espace à deux dimensions. On va donc étudier ce qu'on appelle un système quantique à deux niveaux.

Systèmes à deux niveaux Plus généralement, la pertinence de l'étude à deux niveaux est qu'elle s'applique aux systèmes possédant réellement 2 niveaux comme le spin 1/2 ou la polarisation de la lumière, mais aux systèmes plus complexes possédant un grand nombre de niveau d'énergie mais dont la dynamique est dominée par deux niveaux d'énergie, par exemple l'état fondamental et le premier état excité (si les autres niveaux d'énergie sont beaucoup plus haut) ou notamment deux niveaux interagissant avec un laser réglé à la fréquence de transition.

Maser On peut donner les grands principes ici et l'utiliser comme fil directeur. Le MASER (microwave amplification by stimulated emission of radiation) a été inventé en 1951 par Townes, pour lequel il a reçu le prix Nobel en 1964. C'est un dispositif permettant d'émettre un faisceau cohérent de micro-ondes, analogue du laser dans le domaine micro-ondes. Tout comme le LASER, il y a deux étapes essentielles : inversion de population et émission stimulée.

Objectif Résoudre la dynamique, oscillation de Rabi, comprendre le Maser à ammoniac.

1 Présentation d'un système à deux niveaux

1.1 La molécule NH_3

Maser à ammoniac La lumière du premier maser est issue de l'émission stimulée de transitions énergétiques de la molécules d'ammoniac.

Géométrie La molécule d'ammoniac NH_3 possède une forme pyramidale [On projette un dessin](#). (théorie VSEPR, répulsion maximale des électrons), l'atome d'azote occupe un sommet privilégié de la pyramide car il possède un doublet non liant qui repousse plus les électrons. Les trois hydrogènes les autres sommets qui forme une base triangulaire équilatérale.

Inversion de l'ammoniac Pour commencer, on considère le mouvement relatif de l'atome d'azote de masse m_N et trois atomes d'hydrogènes, considérés comme étant une seule particule fictive de masse $3m_H$. L'ensemble se réduit au mouvement d'une particule fictive de masse réduite $m = 3m_H m_N / (3m_H + m_N)$, dans le référentiel barycentrique (comme pour le problème à deux corps). La particule fictive évolue dans un puits de potentiel unidimensionnel, où le degré de liberté est la position du plan sur l'axe. Quelle est la forme du puits ? Il existe deux états stables classiques à $\pm b$. On y place deux minima. A cause de la répulsion électrostatique, il y a une barrière de potentiel à franchir pour passer d'une configuration à l'autre. [On trace le profil au tableau](#). Le profil de potentiel résultant est un double puits. **ODG:** hauteur de barrière $V_0 = 0.25\text{eV}$, $b = 0.4$ angstrom

Etats symétriques et antisymétriques [On fait des rappels sur transparent](#) On avait vu que pour le cas d'un double puits carré, il y a une levée de dégénérescence (comparé au double puits infini) due au couplage tunnel. Les deux états d'énergie les plus basses sont des états symétriques et antisymétriques, qui ont une densité de probabilité non nulle dans la barrière. Dans les puits, les solutions sont des portions de sinus/cosinus. Dans la barrière, les solutions sont en forme de cosinus/sinus hyperbolique. [On donne l'allure du diagramme d'énergie et de la fonction d'onde](#). **ODG:** leur différence en énergie est 24 Ghz soit 0.1 meV. Le premier état excité est lui aussi clivé en deux sous-niveaux $E_S^1 = E_1 - A_1$ et $E_A^1 = E_1 + A_1$ avec $2A_1 \sim 5 \cdot 10^{-3}\text{eV}$ et $E_1 - E_0 \sim 0.12\text{eV}$.

1.2 Système à deux niveaux

Problème général compliqué Dans le cas général, les mouvements de cette particule plus compliqué que le cas présenté : il y a des mouvements de rotation, de translation, des transitions électroniques, etc. Pour le résoudre, il faudrait écrire le Hamiltonien de ce système à 10 électrons et 4 noyaux et considérer la structure hyperfine.

Ordre de grandeur On donne les ordres de grandeur pour les différentes formes d'excitation **ODG:** 24 Ghz pour l'inversion soit 10^{-4}eV , l'écart avec les niveaux supérieurs est 0.1 eV. Excitation des électrons 1eV, vibration 0.1 eV, rotation 10^{-3} eV. **Il faut savoir les estimer, cf LP gaz parfait/gaz réel.**

Peuplement des niveaux On remarque que les énergies d'excitations des électrons, de vibration et de rotation sont plus grandes que celle du passage d'une configuration à l'autre. **On fait un diagramme d'énergie avec séparation d'échelle** En comparant à l'énergie thermique à 300K, $k_B T \sim 25\text{meV}$, on voit que les niveaux symétriques et antisymétriques fondamentaux sont équipèplés alors que les niveaux excités supérieurs sont très peu peuplés (cf. fiche). De même, les niveaux électroniques et vibrationnels sont peu excités. En revanche, les niveaux rotationnels sont très excités. En termes simples, la molécule tourne rapidement à température ambiante.

Note sur la nécessité d'un rotation La rotation de la molécule sur son axe (ou un moment cinétique intrinsèque) rend les deux états (hauts/bas) non équivalents. On peut définir l'un comme la direction d'alignement du moment cinétique et du moment dipolaire et l'autre comme antialignement. Sinon il aurait fallu décrire le problème avec une coordonnée radiale r et il y aurait eu pas 2 mais 1 seul état quantique. $k_B T \sim 0.025\text{eV} \gg E_{rot} \sim 10^{-3}\text{eV}$

Modélisation par un système à deux niveaux On ne considère alors que deux niveaux d'énergie, correspondants aux deux états qu'on nomme : $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$.

Modélisation mathématique Les deux états propres sont $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$. Le Hamiltonien s'écrit dans la base propre : [expression sur fiche](#). Bien entendu, il ne s'agit pas de l'hamiltonien total de la molécule NH₃, qui est une matrice infinie. C'est la restriction de cet hamiltonien au sous-espace à deux dimensions qui nous intéresse.

1.3 Evolution temporelle

Solution générale, évolution temporelle Puisque qu'on connaît déjà les états propres, on obtient facilement l'évolution d'un état quelconque en le décomposant sur la base propre : [expression et calculs sur fiche](#).

Base gauche-droite [On fait un dessin et on donne le changement de base](#). Physiquement, ce sont les états classiques d'un particule à gauche et à droite.

Inversion de l'ammoniac

[On sort l'animation python de la banque de script!](#) On définit les états classiques gauche et droite. [On fait un dessin](#). Si à $t = 0$ l'ammoniac est dans l'état gauche, elle s'inverse tous les T_{inv} . **ODG: 24 GHz**.

Bonus : analogie avec un oscillateur couplé classique En prenant deux oscillateurs couplés classiques, couplés par un fil de torsion, on observe le même type de solutions!

↓ *On veut expliquer comment marche le maser*

2 Couplage électrique, MASER

Le MASER (microwave amplification by stimulated emission of radiation) a été inventé en 1951 par Townes. On veut expliquer le maser et notamment deux étapes essentielles : inversion de population et émission stimulée.

2.1 Couplage de NH₃ avec un champ électrique statique

Objectif : inversion de population La première étape du MASER ammoniac consiste à séparer les états symétriques des états anti-symétriques. C'est le faisceau d'états anti-symétriques qui nous intéresse par la suite, car ce sont les états de plus haute énergie. Nous allons chercher à stimuler leur désexcitation.

Description du moment dipolaire La molécule d'ammoniac présente un moment électrique dipolaire \vec{D} , porté par l'axe de la molécule, et dirigé de l'atome d'azote vers le plan des hydrogènes en raison de l'électronégativité de l'azote. Comment s'écrit-il en représentation matricielle? L'opérateur \hat{D} n'est pas diagonal dans la base (A, S) mais il l'est dans la base (G, D) . En effet, \hat{D} est proportionnel à l'opérateur position \hat{Z} qui est diagonal dans (G, D) [On donne les expressions](#). On revient alors dans la base (A, S) . [On donne le Hamiltonien](#). **ODG: $d_0 \sim 5.10^{-30}\text{C.m}=0.9\text{ D}$**

Bonus : inégalité de Heisenberg et opérateur position Cette observable \hat{Z} n'est pas exactement, au sens des fonctions d'onde, l'observable position de la particule. Elle détermine la disposition par rapport au centre du potentiel de la particule. On peut vérifier que si l'on tente de définir la position de la particule avec une précision meilleure que

la demi largeur de chaque puits, les relations de Heisenberg font que l'on ne peut plus demeurer dans l'approximation d'un système à deux états. En effet, une définition plus précise de la position entraîne un étalement en impulsion et en énergie cinétique.

Description du couplage En présence d'un champ E selon l'axe X de symétrie de NH_3 , l'énergie potentielle est : [expression sur fiche](#). On traite le rayonnement de manière classique (l'approche est semi-classique). Dans la base (A, S) , le potentiel est alors : [expression sur fiche](#).

Hamiltonien total On rassemble avec le hamiltonien précédent [expression sur fiche](#).

Résolution On fait le calcul rapide de valeur propres, on donne les vecteurs propres en admettant, en expliquant la méthode.

Validité du calcul La règle du jeu est de pouvoir se restreindre aux états d'énergie les plus bas. Il y a donc une limite sur la valeur \mathcal{E} du champ : il doit être tel que $E_+ \ll E_1$ où E_1 est l'énergie du premier état excité. Autrement, les états d'énergie supérieure doivent être incorporés dans le calcul. Étant données les valeurs de A et de $E_1 - E_0$ pour NH_3 , il y a une bonne marge de manoeuvre. L'approximation est justifiée pour tout champ réalisable en laboratoire.
ODG: $E \ll 5 \cdot 10^9 \text{V/m}$

Régime de champ faible L'effet d'un champ faible est de polariser partiellement la molécule. L'écart entre les énergies augmente. Les états propres sont peu modifiés, mais ont un moment dipolaire non nul.

Régime de champ fort Les états propres sont proches de ceux de \hat{D} donc de la base (G, D) . Ils correspondent à des états polarisés. [On donne les asymptotes en énergie](#). Les énergies sont approximativement linéaires dans le champ, comme pour un dipôle classique

Régime intermédiaire Entre ces deux cas limites, on voit que deux effets sont en compétition pour déterminer les états propres de l'hamiltonien total. Le terme de transition A , dû à l'effet tunnel, tend à symétriser la structure de la molécule et à favoriser les états $|\psi_S\rangle$ ou $|\psi_A\rangle$. La présence du champ la polarise et tend à favoriser au contraire les configurations classiques $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$

Inversion de population dans le MASER, sélection Pour séparer les deux états propres, nous appliquons un champ faible. Le champ étant faible, les états propres du hamiltonien H n'ont plus un moment dipolaire nul. En plongeant les molécules d'ammoniac dans un gradient de champ statique, nous pouvons alors séparer les états propres du Hamiltonien. Dans le cas spécifique d'un maser à ammoniac, le champ électrique inhomogène est tel que $\mathcal{E}^2 \propto y^2 + z^2$. Les molécules dans l'état $|\psi_+\rangle$ se trouvent alors dans un potentiel $d_0^2 \mathcal{E}^2 / 2A$ qui est harmonique dans le plan yz perpendiculaire à la direction du faisceau. Leur trajectoire est la superposition d'un mouvement linéaire suivant x et de petites oscillations dans le plan transverse. A l'inverse, des molécules dans l'état $|\psi_-\rangle$ sont placées dans un potentiel harmonique inversé $-d_0^2 \mathcal{E}^2 / 2A$ et sont expulsées du voisinage de l'axe x . L'inhomogénéité du champ permet donc de trier les molécules qui sont dans l'état (de structure interne) $|\psi_+\rangle \sim |\psi_A\rangle$, en les séparant spatialement des molécules dans l'état $|\psi_-\rangle \sim |\psi_S\rangle$. [On montre un schéma](#). *On peut interpréter les énergies propres comme le potentiel de la force de séparation*. Comme les molécules de ce faisceau peuplent un état qui n'est pas leur état fondamental, on dit qu'on a réalisé une inversion de population, on est donc hors équilibre thermodynamique.

Bonus : hypothèse de champ parallèle, structure interne On peut se poser la question de savoir s'il est légitime de supposer le champ électrique parallèle à l'axe de la molécule. Pour traiter cette question correctement, il faut considérer la véritable structure des états symétrique et antisymétrique, ce qui demande de connaître leur moment cinétique. On trouve alors que chaque niveau E_S et E_A est en fait dégénéré. On peut choisir une base des sous-espace propres correspondants \mathcal{E}_S et \mathcal{E}_A telle que chaque état de base corresponde à une valeur donnée de la projection du moment cinétique suivant un axe donné, par exemple la direction du champ électrique à l'endroit où se trouve la molécule. Le traitement exact est plus compliqué³ que ce que nous venons de présenter, mais les conclusions restent les mêmes. L'état interne des molécules peut être développé sur ces états de base, dont certains sont focalisés (comme $|\psi_+\rangle$), et les autres expulsés du centre du faisceau (comme $|\psi_-\rangle$)

↓ *On s'intéresse à un champ oscillant désormais.*

2.2 Champ oscillant, émission stimulée

Emission stimulée Le principe du MASER est d'obliger les molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$ à retomber dans l'état $|\psi_S\rangle$ en restituant alors une énergie $2A$. Spontanément, les molécules se dés excitent avec une durée de vie moyenne

d'environ 1 mois. On peut néanmoins stimuler cette émission en soumettant les molécules à un champ électrique oscillant de pulsation ω : $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$.

Modélisation C'est sur fiche. Le potentiel dépend du temps, il faut résoudre l'équation de Schrödinger temporelle. Posons encore $\eta = d_0 \mathcal{E}_0$; l'hamiltonien dépend maintenant du temps :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \cos \omega t \\ -\eta \cos \omega t & E_0 + A \end{pmatrix}$$

On ne peut plus parler d'états stationnaires et il faut résoudre l'équation de Schrödinger $i\hbar(d/dt)|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ pour connaître l'évolution d'un état. Ecrivons le vecteur d'état d'une molécule comme :

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

L'équation de Schrödinger se ramène au système différentiel linéaire du premier ordre :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a} &= (E_0 - A)a - \eta b \cos \omega t \\ i\hbar\dot{b} &= (E_0 + A)b - \eta a \cos \omega t \end{aligned}$$

En posant $a(t) = e^{-i(E_0-A)t/\hbar}\alpha(t)$ et $b(t) = e^{-i(E_0+A)t/\hbar}\beta(t)$, on obtient :

$$\begin{aligned} 2i\dot{\alpha} &= -\omega_1\beta \left(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t} \right) \\ 2i\dot{\beta} &= -\omega_1\alpha \left(e^{-i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t} \right) \end{aligned}$$

Ce système fait intervenir trois pulsations :

$$\omega, \quad \omega_0 = 2A/\hbar, \quad \text{et} \quad \omega_1 = \eta/\hbar = d_0 \mathcal{E}_0/\hbar$$

Physiquement, ce système différentiel correspond à des oscillations forcées avec un phénomène de résonance⁴ à $\omega = \omega_0$. Sa résolution analytique exacte n'est pas possible, mais on peut en obtenir une excellente solution approchée, au voisinage de la résonance $\omega \sim \omega_0$, en négligeant les termes oscillant rapidement $e^{\pm i(\omega+\omega_0)t}$. On se ramène alors à un système différentiel exactement soluble.

Approximation du champ tournant Physiquement, comme un oscillateur classique forcé à une pulsation propre, on s'attend à une résonance à la pulsation ω_0 . On se place alors dans le référentiel tournant en s'attendant à ce que cela simplifie les calculs.

Solution oscillations de Rabi La probabilité de mesurer le système en ψ_S après l'avoir préparé en ψ_A et avoir attendu un temps t est donnée par les oscillations de Rabi.

Oscillations de Rabi

[On sort le script python.](#)

Analyse de la résonance On remarque que pour $\omega = \omega_0$, la probabilité de transition maximale est égale à 1! La pulsation de Rabi est alors ω_1 , donc au bout de $T = \pi/\omega_1$, il y a une probabilité de 1 pour que toutes les molécules soient passés dans l'état symétrique. Cette émission stimulée d'énergie se fait sous la forme d'un rayonnement électromagnétique de fréquence $f_0 = 24GHz$. Plus ω_1 est faible donc plus le champ est faible, et plus la courbe de résonance est étroite, et donc plus le temps qu'il faut pour restituer l'énergie est grand. **ODG:** Aujourd'hui, on peut sélectionner une bande de largeur $2\omega_1 = 3kHz$, soit $\delta\omega/\omega \sim 10^{-7}$.

2.3 Réalisation technique du MASER

Principes théoriques On a vu les deux principes théoriques : inversion de population et émission stimulée.

Réalisation technique [On commente un schéma, tel que Basdevant p147](#) On a un jet moléculaire dans une enceinte à 100K, on sépare les molécules dans l'état ψ_A avec un champ quadropolaire. On fait passer le faisceau dont la longueur L est ajustée de façon à ce que $L/v = T = (2n+1)\pi/\omega_1$. En pratique, on utilise un asservissement pour maximiser la probabilité de désexcitation. A la sortie, les molécules sont dans l'état $|\psi_S\rangle$ et ont restitué à la cavité leur énergie $2A$ sous forme d'un rayonnement électromagnétique de pulsation ω_0 [On peut aussi commenter la photo](#)

du dispositif originel **ODG**: pour le dispositif de Townes (1951) 10^{14} molécules par seconde, puissance de 10^{-9} W à 24 GHz, bande passante de 3kHz donc un facteur de qualité $Q = 10^7$.

Bonus : sélection des vitesses Comment sélectionner des vitesses pour les atomes/molécules? *Ballistic/temps de vol ou stimulated Raman transitions that couple atomic ground states with counterpropagating laser beams are resonant only within a narrow velocity band..* On applique une impulsion π accordées à une certaine fréquence. Par effet Doppler, les particules voient une fréquence différente en fonction de leur vitesse. Seules les particules ayant la vitesse désirée vont entrer en résonance, subir l'impulsion π et pourront être triées. *On peut utiliser deux laser raman contrapropageant pour induire des transitions à deux photons. Velocity selection with Doppler shifts is a superior velocity preparation technique. The basic idea is to use an atom's internal state as a label for its velocity. Consider, for simplicity, an ensemble of two-level atoms in a travelling wave driving field. If the atoms are prepared initially in one of the two levels and subsequently subjected to Doppler sensitive excitation to the other level, only those atoms having the appropriate Doppler shift, hence velocity, will be resonantly excited. The excited atoms may then be separated from the initial ensemble, if necessary, by some state dependent interaction. Unlike velocity selection with slits, this type of velocity selection does not depend on the initial spatial location and spread of the atoms and is free from wavepacket diffraction effects which might be present with narrow slits. Furthermore, it is intrinsically accurate : distance and time are automatically referenced to the wavelength of the driving field and its frequency. Finally, it is extremely flexible : the center velocity of the distribution is changed by changing the frequency of the driving radiation. For transit-time limited resonances, the velocity spread selected can be controlled by changing the interaction time of the atom with the radiation. Stimulated Raman transitions between hyperfine groundstate levels are ideally suited to implementation of this type of scheme.*

Bonus : Raman transitions Raman spectroscopy is a spectroscopic technique used in condensed matter physics and chemistry to study vibrational, rotational, and other low-frequency modes in a system. In quantum computation, it is not only used for characterising physical systems, but to control their evolution by changing the population of atomic energy levels in a coherent manner. It relies on inelastic scattering, or Raman scattering of monochromatic light, usually from a laser in the visible, near infrared, or near ultraviolet range. When used for spectroscopy, Phonons or other excitations in the system are absorbed or emitted by the laser light, resulting in the energy of the laser photons being shifted up or down. The shift in energy gives information about the phonon modes in the system. Infrared spectroscopy yields similar, but complementary information.

Maser à l'état solide, maser à hydrogène Il y a une multitude d'autres types de masers (et de lasers dont le principe est semblable), fondés sur des effets physiques différents, mais la description mathématique de ces systèmes sera toujours semblable à ce que nous exposons ici. Dans certains cas, il faudra faire intervenir davantage d'états de base (systèmes à trois, quatre niveaux, etc.) mais qualitativement les résultats physiques se comprendront facilement à partir des systèmes à deux états dont NH₃ est le prototype. On utilise des maser à l'état solide comme un cristal de rubis (Al₂O₃ avec des ions Cr³⁺ à 0.05%). **ODG**: gain 36 dB. On a aussi fabriqué des maser à hydrogène.

Application : amplification sélective de signaux On peut utiliser un maser pour amplifier de façon très sélective, et sans bruit de fond, un signal très faible. Pour NH₃, on peut facilement sélectionner une bande de largeur 3kHz, soit $\delta\omega/\omega \sim 10^{-7}$. D'où des applications extrêmement importantes en radioastronomie pour l'étude du milieu interstellaire. Par exemple, on a mesurée le rayonnement fossile du Big Bang à 3K en 1965, mais c'était avec un maser à rubis. Mais pour comprendre l'amplification, il faut considérer un signal entrant étalé en fréquence, et pas monochromatique cohérent comme nous. De plus, ils ont été remplacés par les amplificateurs à base de transistors à effet de champ.

Application : maser astrophysique Le maser astrophysique existe dans l'univers sous la forme occasionnelle d'une source spontanée d'un rayonnement à émission stimulée, détectable dans le spectromètre par la présence d'une raie spectrale, la fréquence dans la plupart des cas se situant dans la région des micro-ondes du spectre électromagnétique. Cette sorte d'émission peut se produire dans le contexte d'une comète, d'un nuage moléculaire, dans une atmosphère planétaire, stellaire, ou bien encore selon d'autres conditions au sein de l'espace interstellaire. On l'utilise aussi en astronomie observationnelle pour détecter l'ammoniac. On observe le rayonnement du milieu interstellaire local, qui est un rayonnement maser excité par son environnement. on peut identifier la présence d'une molécule par un rayonnement bien caractéristique et polarisé.

Comme pour le laser, l'émission d'un maser est stimulée et monochromatique; elle a pour fréquence le niveau correspondant à la différence d'énergie entre deux niveaux d'énergie quantique de l'espèce qui a été "pompée" dans une distribution de population thermiquement quelconque. Le maser d'origine spontanée est par contre différent d'un maser de laboratoire en ce qu'il ne comporte pas d'équivalence à la cavité résonnante (ou résonateur) caractéristique de ces derniers. L'émission du maser astrophysique est le produit d'une passe unique au travers du milieu amplificateur et ainsi ne se préoccupe pas de cohérence spatiale, ni surtout de la pureté de mode qui est attendue de ses équivalents du laboratoire.

Le fait de savoir que l'on a telle ou telle molécule est très important en astro, car la chimie contrôle les taux d'ionisation et donc la dynamique du plasma. Cela permet aussi d'avoir une idée des conditions thermo du milieu, car il faut que la molécule existe. La polarisation d'un maser naturel ne se produit que dans certaines conditions particulières de structure de la pompe spontanée dépendant du champ magnétique dans le milieu amplificateur

Application : maser à hydrogène en métrologie Les masers à hydrogène sont utilisés notamment en interférométrie et en métrologie. Ils servent également à obtenir la fréquence de référence utilisée dans les horloges atomiques. Un champ de pulsation ω_0 va s'auto-entretenir dans la cavité. En évacuant l'onde émise, très monochromatique, on dispose d'un oscillateur extrêmement stable. Maser oscillations rely on the stimulated emission between two hyperfine energy levels of atomic hydrogen.

- a beam of atomic hydrogen is produced. This is done by submitting the gas at low pressure to a high-frequency radio wave discharge
- "state selection" - in order to get some stimulated emission, it is necessary to create a population inversion of the atoms. This is done in a way that is very similar to the Stern–Gerlach experiment.
- After passing through an aperture and a magnetic field, many of the atoms in the beam are left in the upper energy level of the lasing transition. From this state, the atoms can decay to the lower state and emit some microwave radiation.
- A high Q factor (quality factor) microwave cavity confines the microwaves and reinjects them repeatedly into the atom beam. The stimulated emission amplifies the microwaves on each pass through the beam. This combination of amplification and feedback is what defines all oscillators. The resonant frequency of the microwave cavity is tuned to the frequency of the hyperfine energy transition of hydrogen : 1,420,405,752 hertz.

A small fraction of the signal in the microwave cavity is coupled into a coaxial cable and then sent to a coherent radio receiver. The microwave signal coming out of the maser is very weak (a few picowatts). The frequency of the signal is fixed and extremely stable. The coherent receiver is used to amplify the signal and change the frequency. This is done using a series of phase-locked loops and a high performance quartz oscillator.

3 Horloges atomiques

3.1 Horloge atomique

Définition de la seconde Les horloges atomiques, qui sont les étalons de temps actuels, fonctionnent suivant un principe très voisin. De tels appareils utilisent un jet d'atomes de césium (isotope ^{133}Cs). Le niveau fondamental est clivé par interaction hyperfine : interaction entre les moments magnétiques de l'électron (orbital et spin) et du noyau. La seconde est définie à l'aide de la fréquence de transition ν_0 . Par définition du hertz, l'écart $\nu_{12} = (E_2 - E_1)/h$ est égal à 9192631770Hz.

Précision La précision des horloges atomiques est une dérive de l'ordre de **ODG**: 10^{-16} s en 1 seconde. C'est la méthode la plus précise.

Applications Ces horloges sont utiles en métrologie (définition de la seconde), système de positionnement et navigation, pour les systèmes de navigation par GPS et aussi pour les tests de relativité (paradoxe des jumeaux) (aussi l'astrophysique). Permet de borner supérieurement les variations de la constante de structure fine $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$. En CGS, $\alpha = e^2/\hbar c$ en monitorant le rapport des fréquences d'oscillation du Césium et du Rubidium par exemple.

Réalisation d'une horloge atomique

- Un système physique, ici une enceinte chauffée contenant du césium, permet de créer un jet d'atomes.
- Dans ce jet, seuls les atomes correspondant à l'état d'énergie initiale désiré sont conservés : la sélection se faisant par déflexion grâce à un champ magnétique).
- Un oscillateur à quartz (produisant un signal à 10 MHz) est multiplié afin de piloter un générateur micro-ondes à une fréquence ν' , voisine de ν_0 . Ce signal est ensuite injecté dans une cavité résonante. *de type Ramsey*.
- Le jet d'atomes dans l'état E1 passe dans la cavité : plus la fréquence ν' sera proche de ν_0 , plus grand sera le nombre d'atomes qui, par absorption de l'onde, subiront la transition vers l'état E2.
- À la sortie, le jet atomique subit une seconde déflexion magnétique qui sépare les atomes dans l'état E2 de ceux dans l'état E1. Un détecteur, placé dans la trajectoire des atomes dans l'état E2, produit un signal proportionnel au nombre de ces atomes.

- Plus ν' est proche de ν_0 , plus le nombre d'atomes E2 compté en sortie est grand. Un système d'asservissement ajuste en permanence la fréquence de l'oscillateur à quartz pour maximiser le nombre d'atomes dans l'état E2, et donc conserver la fréquence de l'oscillateur proche de la fréquence optimale. La fréquence de l'oscillateur est ainsi asservie à la fréquence de la transition atomique, avec une boucle à verrouillage de phase par exemple.
- Le comptage du temps est ensuite assuré par une division des oscillations de l'oscillateur à quartz, associé à un circuit électronique affichant par exemple l'heure comme dans une montre à quartz.

Les oscillations peuvent aussi être utilisées directement pour piloter des dispositifs ou équipements nécessitant une fréquence de fonctionnement stable.

Vers les franges de Ramsey Dans le maser à ammoniac, la précision est limitée par l'intensité du champ oscillant, donnée par ω_1 . Le facteur de qualité était $Q = 10^7$. Pour atteindre la précision des horloges atomiques $Q = 10^{16}$, il a fallu une amélioration de la méthode : l'interférométrie Ramsey.

3.2 Franges de Ramsey

Principe Le principe est le suivant [On dessine le diagramme au tableau](#).

- Les atomes sont initialement sélectionnés dans l'état fondamental 1.
- A $t = 0$, ils interagissent avec le champ magnétique sous la forme d'une impulsion $\pi/2$. On appelle τ le temps d'interaction correspondant.
- A partir de $t = \tau$, le champ magnétique est coupée et les atomes évoluent librement pendant une durée T .
- A $t = \tau + T$, le champ magnétique est rallumée et les atomes subissent une impulsion $\pi/2$.

La mesure consiste en la détermination du maximum de probabilité de transition des atomes. Avec les notations précédentes.

Courbe de résonance On voit des franges plus fines que la courbe d'avant. **ODG**: 1Hz de largeur pour $10^{10}Hz$ de fréquence de résonance. Donc un facteur de qualité $Q = 10^{10}$. C'est beaucoup mieux qu'avant ! Ce sont les franges de Ramsey (Prix Nobel 1989). On va les expliquer avec une analogie avec les interférences en polarisation.

Analogie avec les interférences en biréfringence [On présente le tableau d'analogie](#)

Spectre cannelé des interférences en biréfringence La différence de marche entre les deux polarisations rectilignes dans le milieu biréfringent vaut $\delta = |n_e - n_o|e = \Delta ne$ où e est l'épaisseur de la lame et $\Delta n = |n_e - n_o|$ la différence d'indice optique des deux axes principaux. Le déphasage vaut

$$\Delta\phi = k\delta = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta ne$$

et dépend linéairement de la fréquence $\nu = c/\lambda$. Les interférences seront alternativement constructives et destructives dans l'espace des fréquences

$$I(\nu) = I_0(1 + \cos(\Delta\phi)) = I_0\left(1 + \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\Delta ne\right)\right)$$

. C'est le spectre cannelé.

Précision : fontaine d'atomes Pour augmenter la précision, il faut augmenter le temps d'attente T . Pour cela, il faut redroïdir les atomes pour éviter la dispersion de vitesse. On peut faire des fontaines d'atomes : un atome fait un aller retour vertical.

Conclusion

Autres système à deux niveaux : méthylène, H_2^+ , la liaison covalente en chimie, les formes mésomères de molécules, la liaison hydrogène...

Ouverture :

Résonance magnétique Analogie.

Ordinateur quantique Les recherches en informatique quantique se basent sur le fait qu'un système à deux niveau quantique est une combinaison linéaire d'états de base. Le bit classique (0 ou 1 exclusivement), qui permet de stocker l'information, serait remplacé par un bit quantique (combinaison linéaire des états 0 et 1). Les oscillations de Rabi, avec des impulsions de durée bien choisie, permettent de manipuler les qubit.

Compléments/Questions

- RMN
- Analogie Mécanique avec les pendules couplés par un fil de torsion.

RMN

Résonance magnétique Contrairement à l'électron, le proton a un rapport gyromagnétique positif : la précession à la fréquence de Larmor ω_0 se fait en sens inverse. On impose un champ constant dans une direction (effet Zeeman) et un champ tournant dans le plan perpendiculaire. Le Hamiltonien dépend du temps. On se place dans le référentiel tournant à la vitesse ω du champ pour se ramener à un hamiltonien stationnaire. On trouve alors que dans le référentiel tournant, le spin précesse autour de B_1 à vitesse $\omega_1 = B_1/\gamma$ la fréquence de Rabi/de nutation. Géométriquement [Le Bellac p164], on voit l'alternance du spin entre les états up et down à la résonance (précession dans le plan perpendiculaire à B_1) et hors résonance, le spin précesse, dans le référentiel tournant, autour de $B_{eff} = B_0 + B_1$. On trouve alors les caractéristiques des oscillations de Rabi, les deux états étant le spin up et down.

Principe de la RMN On applique un champ continu de 20 T. A température ambiante, la statistique de Boltzmann donne que les niveaux Zeeman sont équilibreés à 10^{-5} près. Si on applique une impulsion π avec un champ tournant B_1 (pendant la bonne durée), on provoque un retournement de spin donc une inversion de population (les deux ne se retournent pas ?). En pratique, on applique une impulsion $\pi/2$ pour faire basculer le spin sur l'équateur, on étudie la relaxation : la TF donne les fréquences de résonance. Les fréquences de résonance dépendent de l'environnement chimique (écranage, multiplicité).

Principe de l'IRM On s'intéresse aux protons dans l'eau et les graisses. L'amplitude du signal est proportionnel à la densité de spin, donc des protons. On peut dresser une cartographie 3D de 1 mm de résolution en 0.1s.

Passage

Questions

- Comment prendre en compte l'émission spontanée dans les équations ? Comment expliquer à un élève l'émission stimulée ? Quelles différences entre émissions stimulée et spontanée ? Comment créer l'inversion de population pour le MASER ? Pour un laser ? Possible de réaliser l'inversion avec deux niveaux ? Pas optiquement, mais électriquement oui. Comment fonctionne un laser à trois niveaux ? Vous avez seulement présenté des pulses π , quelles utilisations des pulses $\pi/2$? Comment expliquer à un élève, sans calcul ("puisque vous avez quand même fait beaucoup de calculs"), l'écart d'énergie entre les états symétrique et antisymétrique ? Elles voulaient apparemment un raisonnement avec la forme du puits et avec la relation d'incertitude, j'ai pas vraiment compris. Comment sélectionner les vitesses des atomes en entrée du MASER à ammoniac ? Quelle distribution de vitesse ? Quelle influence sur les molécules en sortie du dispositif ? Sur l'émission ?
- Peut-on réaliser une inversion de population lorsque l'on a deux niveaux ? - Lien entre absorption et émission pour le corps noir ? (je n'ai pas compris où ils voulaient en venir) Questions sur les profils de raie, doppler, chocs, Voigt, etc. - Émission stimulée, deux photons identiques, pas incompatible avec Pauli ?
- Vous avez parlé des postulats de la mécanique quantique. C'est quoi ? À quoi servent-ils ? D'où vient l'expression du ket dépendant du temps comme combinaison linéaire des états propres pondérés par les exponentielles ? Vous avez parlé de « résonance », en quoi est-ce une résonance ? Vos exemples portaient sur des systèmes forcés ou pas ? Discussion sur les niveaux d'énergie dans l'exemple de l'ammoniac. Pouvez-vous nous réexpliquer, l'approximation du système à deux niveaux dans le cas de l'ammoniac ? Comment et pourquoi passe-t-on d'un puits à l'autre dans l'exemple de la molécule d'ammoniac ? Qu'est-ce qu'un état fondamental ? Que représentent les angles ϕ et θ introduits ? À quels paramètres sont-ils liés ?
- Donner l'équation de Schrödinger Quelle formulation est la plus générale : dépendante ou indépendante du temps ? Qu'est-ce qu'un état stationnaire ? Qu'est-ce qu'une perturbation ? Comment s'écrit l'énergie potentielle d'une particule dans un champ électrique en classique ? Que représente physiquement le δ du moment dipolaire ? Comment visualiser l'évolution temporelle d'un système quantique ?
- Pourquoi, au bout d'un certain temps, un système d'oscillateurs couplés se met dans le mode de vibration symétrique (oscillations en phase) ? En mécanique quantique, quelle est l'origine du couplage entre les deux puits ?

- Comment obtient-on le jeu d'équations différentielles pour les pendules ? Obtention de l'expression de l'énergie des pendules ? Est-ce que les modes propres en mécanique classique et les états propres en mécanique quantique représentent la même chose ? Quelles hypothèses pour pouvoir négliger le déplacement vertical des pendules ? Comment justifier l'approximation de Born-Oppenheimer ? Pourquoi chercher la solution sous forme de combinaisons linéaires des solutions des systèmes découplés ? Est-ce que c'est exact ? Définition d'un mode propre ? Influence du couplage dans les deux systèmes ? À quelle condition on observe des battements ? Comment fonctionne le logiciel videocom utilisé ?
- Comment expliquer de manière rigoureuse (sans utiliser les symétries du problème) que la fonction d'onde en mécanique quantique et la fonction déplacement en mécanique classique puissent se décomposer en une partie symétrique et une partie antisymétrique ?
- Qu'en est-il pour la fonction d'onde d'un système de particules indiscernables ?
- Peut-on traiter le problème de la molécule d'ammoniac en utilisant la théorie des perturbation ?
- Lors de la levée de dégénérescence des niveaux d'énergie de la molécule d'ammoniac, l'énergie moyenne des deux niveaux est plus basse que l'énergie du niveau de départ. Pourquoi ? Ce phénomène existe-t-il en mécanique classique ?
- Comment mettre en évidence par l'algèbre linéaire l'existence d'un mode symétrique et d'un mode antisymétrique en mécanique classique ?
- Comment obtenir par la même méthode (algèbre linéaire) l'énergie des niveaux non dégénérés de la molécule d'ammoniac ?
- Sur l'enregistrement des battements des pendules couplés (sur synchronie) on observe un autre phénomène (décroissance) à quoi est-il dû ?
- Quel type de frottement est-ce ? Comment le savoir ?
- Par un enregistrement comment savoir si on observe un seul mode ou les deux modes ?
- Quelle est la quantité échangée entre les deux pendules couplés lors d'une oscillation quelconque ?
- Quelle est la quantité échangée dans le cas de la mécanique quantique ?
- Vous avez dit : « en mécanique quantique c'est la fonction d'onde qui oscille entre les deux niveaux d'énergie ». Quelle est la quantité qui oscille en mécanique classique ?
- La fonction d'onde n'est-elle pas l'équivalent quantique de la position du système classique ?

- Peut-on justifier semi-classiquement la relation entre le moment magnétique et le moment cinétique d'une particule ?
- Qu'est-ce que le facteur de Landé ? Que vaut-il dans le cas d'un moment de spin ? D'un moment orbital ? D'une combinaison des deux ?
- Vous avez cité des valeurs typiques de champs magnétiques utilisés pour la RMN : cela correspond-il à des champs magnétiques forts ? Comment peut-on produire de tels champs magnétiques ?
- Dans le phénomène d'oscillation de Rabi, quelle est la forme de l'amplitude des oscillations en fonction de la fréquence ω ? Comment mesurer grâce à ça la fréquence ω_1 ? (largeur de la distribution Lorentzienne)
- Les états Ψ_1 et Ψ_2 du double puits fini sont-ils égaux aux états Ψ_G et Ψ_D du double puits infini ?
- Dans le double puits, combien existe-il d'états propres de l'Hamiltonien ? Quelles sont leur énergie ? Pourquoi peut-on se restreindre aux deux premiers états ?

5

-
- Si une molécule d'ammoniac est à l'instant initial dans l'état Ψ_A , peut-elle passer à l'état Ψ_S au bout d'un certain temps ? Au bout de combien de temps ?
 - Quelle est la longueur d'onde du rayonnement obtenu par l'effet MASER ?
 - Comment se modélise le couplage de la molécule d'ammoniac avec un champ électrique extérieur ? Qualitativement, comment est le moment dipolaire de la molécule ?
 - Peut-on résoudre les calculs de l'effet MASER en dehors de la résonance ?
 - Quelles sont les applications des horloges atomiques ?