

Horloge à Amoniac

Introduction

Dans ce bureau d'étude, on s'intéresse aux phénomènes physiques à la base du fonctionnement d'une horloge de haute précision dont la mise au point date des années 1950, mais qui reste aujourd'hui encore très utilisée dans des applications nécessitant un étalon de temps stable et précis¹.

Pour mener cette étude, on s'appuiera sur les articles suivants :

- article 1 : « Atomic Clocks », H. Lyons, Scientific American 196,71 (Feb 1957)
- article 2 : « The Maser », J. P. Gordon, Scientific American 199,42 (Dec 1958)

Partie I : Compréhension des articles

L'objectif de cette partie est de s'assurer d'une bonne compréhension globale des articles 1 et 2 *sans développements calculatoires*.

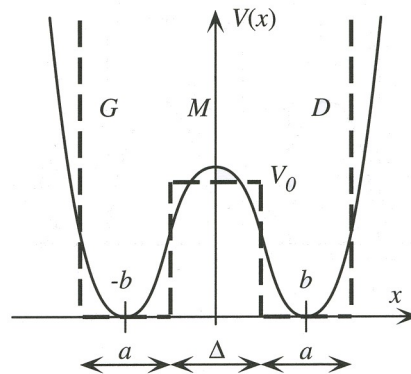
1. Résumer en quelques lignes l'article 1 en soulignant les enjeux scientifiques et technologiques.
2. En quoi les atomes constituent-ils « *une meilleure référence fréquentielle* » qu'un oscillateur à quartz ?
3. En quoi peut-on dire que les horloges atomiques sont un pur produit de la physique quantique ?
4. Quelles sont les fréquences des horloges atomiques décrites dans l'article ? Indiquer leur précisions et les causes possibles de leur dérives et imprécision.
5. Décrire schématiquement les principes d'une horloge à quartz et d'une horloge à amoniac.
6. Quelle différence de principe y-a-t-il entre une horloge à amoniac et une horloge à maser ?
7. Quelles sont les applications des horloges atomiques ?
8. Décrire dans les grandes lignes le principe d'un maser à amoniac.
9. Quelle différence y-a-t-il entre un maser et un laser ?
10. Quelles sont les applications des maser (article 2).

¹ Voir par exemple l'horloge utilisée dans le projet Pharaon (Projet d'Horloge Atomique par Refroidissement d'Atomes en Orbite) du CNES (<http://www2.cnrs.fr/presse/journal/1635.htm>) qui utilise un maser à hydrogène dont le principe est analogue à celui du maser à amoniac de ce bureau d'étude

Partie II : Modélisation de la molécule d'amoniac

L'objectif de cette partie est de modéliser le comportement quantique de la molécule d'amoniac à la base du fonctionnement de l'horloge. Dans cette étude, nous nous appuyerons sur la description des phénomènes physiques donnée à la page 45 de l'article 1 ainsi que les figures qui l'accompagnent.

On supposera que la molécule reste toujours pyramidale et on notera x la distance algébrique de l'atome d'azote au plan contenant les atomes d'hydrogène.



Modélisation de l'énergie potentielle d'une molécule d'amoniac

1. Expliquer qualitativement pourquoi l'énergie potentielle, $V(x)$, de la molécule d'amoniac peut être modélisée par la *courbe en trait plein* de la figure ci-dessus. On indiquera notamment à quoi correspondent physiquement les minima de $V(x)$ en $x = -b$ et $x = b$.

Par la suite, on remplacera le potentiel $V(x)$ par la courbe en pointillée qui reproduit les caractéristiques qualitatives de la courbe en trait plein tout en permettant une étude analytique.

On commence par analyser le comportement « classique » de la molécule.

2. Décrire qualitativement le(s) comportement(s) possible(s) de la molécule lorsque son énergie totale E est supérieure à V_0 .
3. Même question lorsque $E < V_0$.

L'étude quantique commence par la recherche des niveaux d'énergie du système dans le cas limite où $V_0 \rightarrow +\infty$. Il s'agit alors de deux puits de potentiels indépendants et infiniment profonds.

4. Quelle est la probabilité de passage de l'azote de part et d'autre du plan des hydrogènes ?
5. Déterminer l'expression des états stationnaires $\{E_n, \phi_n(x)\}$.
6. Quel est le degré de dégénérescence associé à chaque niveau d'énergie ?

On restreint le système à son état fondamental E_0 et on note $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ les états qui représentent à une localisation « classique » de l'atome d'azote respectivement à gauche et à droite des hydrogènes¹. Cette restriction de l'étude à un espace de Hilbert de dimension 2 sera justifiée par la suite.

7. Représenter les fonctions $\psi_D(x)=\langle x|\psi_D\rangle$ et $\psi_G(x)=\langle x|\psi_G\rangle$.
8. Vérifier que la base $\{|\psi_D\rangle, |\psi_G\rangle\}$ est bien orthonormée.
9. Donner l'expression matricielle de l'opérateur Hamiltonien, H , dans cette base.

On considère désormais que la barrière de potentiel est de hauteur finie V_0 . Pour traduire cet effet, on ajoute empiriquement à la matrice de H précédente, la matrice suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & -A \\ -A & 0 \end{pmatrix}, \text{ avec } A > 0.$$

10. Déterminer les nouveaux états d'énergie du système, (E_S, E_A) avec $E_A > E_S$ associés à la nouvelle base d'états stationnaires orthonormés $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. On vérifiera que $\psi_S(x)$ est une fonction paire (« Symétrique ») et $\psi_A(x)$ une fonction impaire (« Antisymétrique »).
11. Interpréter l'extension des fonctions $\psi_S(x)$ et $\psi_A(x)$ dans les deux puits G et D. Comment l'atome d'azote passe-t-il d'un puit à l'autre ?

Avant de poursuivre l'étude, nous allons justifier sa restriction au niveaux d'énergie (E_S, E_A) . Pour la molécule d'amoniac, on détermine expérimentalement $a = 0,2$ nm et $A = 5.10^{-5}$ eV.

12. Déterminer la différence entre les deux premiers niveaux d'énergie $E_1 - E_0$.
13. Partant d'une répartition des populations de molécules d'énergie E_i et E_j donnée à l'équilibre thermique par la loi de Boltzmann : $N(E_j)/N(E_i) = e^{-(E_j - E_i)/k_B T}$, montrer que la probabilité de trouver la molécule dans un état d'énergie supérieur à E_A est très faible.

Dorénavant, nous continuerons l'étude en la restreignant à un espace de Hilbert de dimension 2 dont deux bases orthonormées possibles sont $\{|\psi_D\rangle, |\psi_G\rangle\}$ et $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$.

Plaçons nous dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. le système est, à l'instant initial, dans un état quelconque : $|\psi(0)\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle$, où λ et μ sont deux nombres complexes tels que $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$.

14. Que représente physiquement $|\lambda|^2$ et $|\mu|^2$?

¹ Pour faire le lien avec la figure 1 de l'article 2, on fera pivoter la molécule d'amoniac de 90°.

15. Rappeler l'expression de la matrice de l'Hamiltonien H du système restreint à cette base.
 16. Déterminer l'expression de l'évolution temporelle de l'état du système $|\psi(t)\rangle$.

On posera $2A = \hbar \omega_0$.

Examinons le cas particulier $\lambda = \mu = 1/\sqrt{2}$ pour lequel $|\psi(0)\rangle = |\psi_D\rangle$.

17. Que devient $|\psi(t)\rangle$ pour $t = \pi/\omega_0$ puis $t = 2\pi/\omega_0$. Interprétation ?

Considérons maintenant l'observable \hat{X} dont l'expression dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$ est :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

18. Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de \hat{X} .
 19. En déduire que cette observable correspond au paramètre physique « disposition de la l'atome d'azote par rapport au plan des atomes d'hydrogène »¹.
 20. Déterminer l'expression de la valeur moyenne $\langle \hat{X} \rangle_{\psi(0)}$ de l'observable \hat{X} dans l'état $|\psi(0)\rangle$.
 21. Examiner et interpréter le cas particulier $\lambda = \mu = 1/\sqrt{2}$. A quoi correspond physiquement la pulsation ω_0 ?
 22. Calculer numériquement la pulsation ω_0 puis la fréquence f_0 .

Partie III : Absorption d'une onde électromagnétique par les molécules d'amoniac

L'objectif de cette partie est de modéliser le phénomène d'absorption d'une onde électromagnétique par une molécule d'amoniac (décrit page 74 de l'article 1).

1. Comment ce phénomène est-il exploité dans le dispositif pour permettre de stabiliser l'étalon de fréquence fourni par l'horloge.
2. Décrire (éventuellement schématiquement) le principe de la « chambre d'absorption » de la figure du haut de la page 74.

¹ Attention : \hat{X} n'est pas au sens des fonctions d'onde l'observable correspondant à la position de l'atome d'azote. Pour s'en convaincre, il suffit de remarquer que \hat{X} est sans unité et de dimension finie, ce qui n'est pas évidemment pas le cas de l'observable position.

Le phénomène d'absorption résulte d'une interaction entre le champ électrique ξ de l'onde électromagnétique et le moment dipolaire D de la molécule d'amoniac. Ce moment dipolaire est porté par l'axe de symétrie de la molécule pour des raisons de symétrie évidentes, et dirigé de l'atome d'azote vers le plan des hydrogène car l'azote est électronégatif et attire les électrons. Bien évidemment, l'orientation de D change de signe selon la conformation de la molécule.

On suppose pour simplifier que ξ est parallèle à x on supposera que l'observable « moment dipolaire électrique » de la molécule selon x est donné par :

$$D = d_0 \hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & d_0 \\ d_0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ où } d_0 \text{ est un paramètre mesurable de la molécule.}$$

- Rappeler l'expression de l'énergie potentielle d'interaction, W , entre le dipôle D et le champ ξ . Donner l'expression de l'observable de W dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$.
- En déduire l'expression de la matrice de l'Hamiltonien H du système dans cette même base.

Le champ électrique oscillant de l'onde électromagnétique s'écrit $\xi = \xi_0 \cos \omega t$. On suppose le système dans l'état quelconque $|\psi(t)\rangle = a(t)|\psi_S\rangle + b(t)|\psi_A\rangle$.

- En écrivant matriciellement l'équation de Schrodinger, établir les équations d'évolution du système sous la forme :

$$i\hbar \frac{da}{dt} = (E_0 - A)a - \eta b \cos \omega t,$$

$$i\hbar \frac{db}{dt} = (E_0 + A)b - \eta a \cos \omega t.$$

Déterminer le paramètre η en fonction de d_0 et ξ .

- En posant $a(t) = e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} \alpha(t)$ et $b(t) = e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} \beta(t)$, montrer que ces équations peuvent se mettre sous la forme :

$$2i \frac{d\alpha}{dt} = -\omega_1 \beta (e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t}),$$

$$2i \frac{d\beta}{dt} = -\omega_1 \alpha (e^{-i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t}), \text{ avec } \omega_1 = \eta/\hbar.$$

La résolution analytique exacte de ce système différentiel est impossible, mais on peut en obtenir une excellente solution approchée lorsque $\omega \sim \omega_0$, en négligeant les termes oscillant rapidement $e^{\pm i(\omega + \omega_0)t}$.

7. En supposant que le système est initialement dans l'état $|\psi_S\rangle$ ($b(0)=0$) et compte-tenu de l'approximation précédente, montrer que la probabilité de transition $P_{S \rightarrow A}(t)$ qu'au bout du temps t les molécules d'amoniac, sous l'influence du champ oscillant, soient passées dans l'état $|\psi_S\rangle$ en « absorbant » l'énergie $2A$ est donnée par :

$$P_{S \rightarrow A}(t) \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} t / 2)$$

8. Représenter graphiquement $P_{S \rightarrow A}(t)$ et $P_{max}(\omega) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$.
9. Au bout de quel temps T pratiquement toutes les molécules ont absorbées l'énergie $2A$ et occupent ainsi le niveau « excité » E_A ?

Calculer numériquement T avec $d_0 = 3 \cdot 10^{-11} \text{ eV} / (V/m)$ et $\xi_0 = 310^3 \text{ V/m}$.

Partie IV : Maser

L'objectif de cette partie est d'étudier les principes du maser décrits qualitativement en pages 78 à 81 de l'article 1 et plus en détail dans l'article 2. Le maser permet d'améliorer la précision et la stabilité de l'horloge.

L'acronyme M.A.S.E.R. signifie « Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiations ». Comme le LASER, le MASER exploite le mécanisme d'émission stimulée mais il en diffère par une technologie adaptée à la bande de fréquence correspondant aux micro-ondes (cf. calcul de ω_0 et f_0 , partie 2 question 22).

1. A l'aide des articles 1 et 2 expliquer en quelques lignes le principe d'un Maser. Schématiser le principe de l'émission stimulée, décrire les fonctions et composants utilisés pour l'obtention d'une oscillation « Maser », et schématiser le système complet.

Dans un premier temps, nous allons modéliser le phénomène d'inversion de population nécessaire à l'obtention du mécanisme d'amplification « photonique » à la base du Maser. Cette inversion de population s'obtient via l'interaction des molécules d'amoniac avec un champ électrique statique ξ_{st} que nous supposerons comme dans la partie précédente parallèle à x .

2. Expliquer qualitativement pourquoi le mécanisme d'amplification « photonique » nécessite une inversion de population sur les niveaux E_A et E_S .
3. Déterminer l'expression de la matrice de l'Hamiltonien H du système et montrer qu'elle peut se mettre, dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$, sous la forme :

$$H = E_0 \cdot I - \sqrt{A^2 + \eta^2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix},$$

avec $\tan 2\theta = \xi_{st} d_0 / A$ et I la matrice unité.

- Déterminer les nouveaux états d'énergie (E_H, E_L) (avec $E_H > E_L$) du système ainsi que les nouveaux états propres de H , $|\psi_H\rangle$ et $|\psi_L\rangle$.
- Montrer que dans le régime de champ faible, les niveaux et les états propres s'écrivent approximativement :

$$E_{H,L} \approx E_0 \pm \left(A + \frac{d_0^2 \xi_{st}^2}{2A} \right),$$

$$|\psi_L\rangle \approx |\psi_S\rangle + \frac{d_0 \xi_{st}}{2A} |\psi_A\rangle,$$

$$|\psi_H\rangle \approx |\psi_A\rangle - \frac{d_0 \xi_{st}}{2A} |\psi_S\rangle.$$

- En déduire que l'effet du champ statique est de polariser partiellement la molécule. Calculer approximativement la valeur moyenne du moment dipolaire induit $\langle D \rangle_{\psi_H, \psi_L}$ dans les états $|\psi_H\rangle$ et $|\psi_L\rangle$.

La valeur de $\langle D \rangle_{\psi_H, \psi_L}$ est proportionnelle au champ ξ_{st} et la valeur absolue du coefficient de proportionnalité s'appelle la polarisabilité de la molécule.

- Représenter graphiquement $E_{H,L}(\frac{d_0 \xi_{st}}{2A})$.

Pour réaliser l'inversion de population, il faut un dispositif capable de filtrer les molécules pour ne garder que celles sur le niveau supérieur E_A .

En régime de champs faibles le terme $d_0^2 \xi_{st}^2 / 2A$ des équations établies à la question 4 peut-être interprété comme un terme d'énergie potentielle de la molécule d'amoniac dans le champ électrique.

Préparons un jet moléculaire se propageant suivant la direction x auquel nous faisons traverser une région où règne un champ électrique inhomogène tel que $\xi_{st} \propto (y^2 + z^2)$ (la plan yOz est donc perpendiculaire à la direction x). Ces molécules sont de « gros » objets, et leur mouvement peut-être décrit en bonne approximation de façon classique.

- Quelles forces subissent les molécules d'amoniac selon qu'elles sont dans l'état $|\psi_L\rangle$ ou $|\psi_H\rangle$.
- Faire un schéma du dispositif et montrer sur ce schéma comment un tel dispositif permet de trier les molécules en séparant spatialement celles qui sont dans l'état $|\psi_L\rangle$ de celles qui sont dans l'état $|\psi_H\rangle$.

L'inversion de population étant obtenue en sortie du dispositif précédent, il faut maintenant stimuler l'émission d'un photon en soumettant les molécules du niveau E_A à une onde électromagnétique, plus particulièrement au champ électrique oscillant de cette onde.

10. Montrer sans calculs et en reprenant la démarche de la partie III, que l'émission stimulée se traite théoriquement exactement de la même façon que l'absorption.
11. Expliquer qualitativement pourquoi le photon provoquant l'émission stimulée et le photon libéré ont les mêmes caractéristiques (fréquence, direction,...). Conclure sur les propriétés du rayonnement du maser.
12. Expliquer pourquoi le maser permet d'améliorer la précision et la stabilité de l'horloge.

Remarque : livrées à elles-mêmes, les molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$ retombent dans l'état $|\psi_S\rangle$ par le phénomène d'émission spontanée. Le temps moyen de l'émission spontanée est cependant très long (1 mois) dans le cas des molécules d'amoniac¹. C'est donc l'émission stimulée qui prédomine dans le Maser.

Pour obtenir un Maser, il reste enfin à créer les conditions d'une oscillation auto-entretenu. C'est le rôle d'une cavité électromagnétique qui ne laisse sortir qu'une partie de l'onde monochromatique et réinjecte l'autre partie dans la cavité.

13. Montrer qualitativement comment une telle cavité associé à un dispositif d'amplification peut jouer un rôle pour les photons analogue à celui joué par l'oscillateur électronique pour les électrons.

Partie V : Conclusions

Résumer l'ensemble de vos résultats théoriques et donner en quelques lignes vos conclusion sur quand à l'intérêt d'un maser à amoniac comme étalon de temps.

¹ ce qui n'est pas le cas pour d'autres molécules ou atomes, le choix du matériau est donc crucial pour un maser (de même que pour un laser).